65. ZJAZD CHEMIKOV

9. – 13. september 2013
Vysoké Tatry, Tatranské Matliare, hotelový komplex Hutník

HLAVNÝ ORGANIZÁTOR

Slovenská chemická spoločnosť

v spolupráci

Asociácia slovenských chemických
a farmaceutických spoločností

Asociace českých chemických společností

ORGANIZAČNÝ VÝBOR

Dušan Velič – predseda
Monika Jerigová – výkonná tajomníčka
Zuzana Hloušková – hospodárka
Miroslav Michalka – technické zabezpečenie
Mária Omastová – vedecká tajomníčka
Jitka Ulrichová – vedecká tajomníčka

PROGRAMOVÝ VÝBOR

Prof. Ing. Dr. Jozef Tomko, DrSc. (SChS)
Doc. RNDr. Milan Drábik, PhD. (SChS)
Ing. Miloš Revús (SSPCH, BA)
RNDr. Dalma Gyepesová, CSc. (SChS)
Doc. RNDr. Marta Sališová, CSc. (SChS)
Prof. Ing. Vlasta Brezová, DrSc. (SChS)
Ing. Mária Omastová, DrSc. (SChS)
Ing. Marián Janek, PhD. (SChS)
RNDr. Jozef Tatiersky, PhD. (SChS)
Mgr. Katarína Javorová (SChS)
Dr.h.c. prof. Ing. Karol Florián, DrSc. (SCHS)
Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc. (STU, BA)
Prof. Ing. Marián Koman, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Ján Moncoľ, PhD. (STU, BA)
Prof. Ing. Martin Bajús, DrSc. (STU, BA)
Ing. Michal Korenko, PhD. (SAV, BA)
Prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc. (STU, BA)
Doc. RNDr. Andrej Boháč, CSc. (UK, BA)
Doc. Ing. Milan Vrška,CSc. (STU, BA)
Prof. RNDr. Milan Hutta, DrSc. (UK, BA)
Doc. RNDr. Jozef Kuruc, PhD. (UK, BA)
Prof. Ing. Milan Remko, DrSc. (UK, BA)
Prof. Ing. Ľubor Fišera, DrSc. (STU, BA)
Doc. Ing. Dušan Berek, DrSc. (SAV, BA)
Prof. Ing. Štefan Schmidt, PhD. (STU, BA)
Ing. Ján Hirsch, DrSc. (SAV, BA)
Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc. (STU, BA)
Prof. Ing. Vasil Koprda, DrSc. (STU, BA)
Doc.Ing. Ján Reguli, PhD. (TU, TT)
Doc. RNDr. Martin Putala, PhD. (UK, BA)
Doc. RNDr. Taťána Gondová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Mária Reháková, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Renáta Oriňáková, CSc. (TU, KE)
Prof. RNDr. Nadežda Števulová, PhD. (TU, KE)
RNDr. Slávka Hamuľáková, PhD. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Mária Ganajová, CSc. (UPJŠ, KE)
Doc. RNDr. Magdaléna Bálintová, PhD. (TU, KE)
Ing. Elena Kulichová (Nováky)
RNDr. Beáta Vranovičová, PhD. (UCM, TT)

PROGRAM 65. ZJAZDU CHEMIKOV

Pondelok 9. 9. 2013

09:00 – 18:30	Registrácia účastníkov, recepcia Hutníka II
14:00 – 18:30	Organizovaný odvoz autobusmi zo železničnej stanice Poprad
19:00 – 24:00	Uvítací večierok

Utorok 10. 9. 2013

08:30 – 09:00	Odvoz autobusmi z hotelového komplexu Hutník do Tatranskej Lomnice, kino Tatry
09:00 – 09:15	Otvorenie zjazdu, kino Tatry
09:15 – 10:00	**Plenárna nobelovská prednáška – prof. Ada E. Yonath**
10:00 – 11:30	Príhovory zástupcov sponzorov, predstaviteľov chemických spoločností a asociácií a funkcionárov SAV a fakúlt s chemickým profilom
11:30 – 12:00	Odvoz autobusmi z Tatranskej Lomnice do hotelového komplexu Hutník
12:30 – 14:20	Obed v hotelovom komplexe Hutník
14:20 – 18:00	Prednášky v sekciách, príprava posterov
18:00 – 20:00	Večera v hotelovom komplexe Hutník
20:00 – 24:00	Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, vínny večer

Streda 11. 9. 2013

08:30 – 12:25	Prednášky v sekciách, príprava posterov
12:30 – 14:20	Obed v hotelovom komplexe Hutník
14:00 – 18:00	Výlety
18:00 – 20:00	Večera v hotelovom komplexe Hutník
20:00 – 21:00	Seminár k 265. narodeninám Leopolda Antona Ruprechta, významného chemika 18. storočia, rodáka zo Smolníka
20:00 – 24:00	Posterové prezentácie, hotelový komplex Hutník - telocvičňa, pivný večer
20:30 – 21:30	Valné zhromaždenie SCHS

Štvrtok 12. 9. 2013

08:30 – 12:25	Prednášky v sekciách
12:30 – 14:20	Obed v hotelovom komplexe Hutník
14:30 – 18:15	Prednášky v sekciách
19:00 – 24:00	Záverečný večierok, hotel Hutník, vyhodnotenie súťaže posterov

Piatok 13. 9. 2013

08:30 – 11:05	Prednášky v sekciách
11:10 – 12:00	Panelová diskusia ako záver zjazdu
12:00 – 14:00	Obed v hotelovom komplexe Hutník, odchod

SEKCIE ZJAZDU A GARANTI

1. **Analytická a fyzikálna chémia**
   Analytická chémia, Fyzikálna chémia, Teoretická chémia, Jadrová chémia, Elektrochémia, Fotochémia, Chromatografia, Chemometria, Molekulové modelovanie, Počítačová chémia, Laserová chémia, Molekulárna spektroskopia, Chemická fyzika

   Prof. Ing. Peter Šimon, DrSc.
   Ústav analytickej chémie, FCHPT STU, Bratislava

2. **Anorganická a materiálová chémia**
   Koordinačná chémia, Bioanorganická chémia, Anorganická supramolekulová chémia,Organokovová chémia (z hľadiska štruktúry a koordinácie a vlastnosti kovového prvku), Kryštálové inžinierstvo

   Doc. Ing. Ján Moncoľ, PhD.
   Ústav anorganickej chémie, SAV, Bratislava

3. **Organická chémia a polyméry**
   Organická chémia, Polyméry, Vlákna, textil a fólie, Sacharidy a glykokonjugáty, Farmaceutická chémia, Drevo, celulóza a papier

   Prof. Ing. Viktor Milata, DrSc.
   Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, Bratislava

4. **Vyučovanie a história chémie**
   Vyučovanie chémie, História chémie, Prezentácia chémie verejnosti, Chemická informatika

   Doc. Ing. Ján Reguli, CSc.
   Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského, Bratislava

5. **Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia**
   Potravinárska chémia, Životné prostredie, Biotechnológia, Biochémia, Toxikológia, Rádioekológia, Molekulárna biológia

   Prof. Ing. Štefan Schmidt, CSc.
   Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU, Bratislava

6. **CHEMPROGRESS**
   Priemyselné inžinierstvo, Technológie (chemické, energetické, petrochemické, recyklačné), Alternatívne suroviny, Prepojenie vedy, priemyslu a školstva

   Prof. Ing. Martin Bajus, DrSc.
   Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, FCHPT STU, Bratislava

   Posterová sekcia
   Doc. RNDr. Milan Drábik CSc., RNDr. Katarína Javorová PhD.

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

PP	**Ada E. Yonath**	From basic science to advances in medicine

ZOZNAM POZVANÝCH PREDNÁŠOK

PP1	**Miroslav Urban**	Spolupráca experimentu a počítačovej chémie: Elektrónová afinita uracilu a ďalšie aplikácie
PP2	**Filip Bureš**	Heterocyklické akceptorní jednotky v push-pull chromoforech
PP3	**Eva E. Wille**	ChemPubSoc Europe and Slovak Chemical Society
PP4	**Vladimír Zeleňák**	Od pórovitých koordinačných polymérov a usporiadaných pórovitých oxidov k multifunkčným nanopórovitým materiálom
PP5	**Miroslav Prokša**	Stav a vývojové trendy vyučovania chémie v didaktickej teórii a praxi
PP6	**Igor Bodík**	Anaeróbna fermentácia kuchynských odpadov - potenciálny zdroj energie
PP7	**Martin Bajus**	Druhá generácia biopalív a chemikálií z termických a katalytických premien biomasy
PP8	**David Lukáš**	Nové varianty elektrostatického zvlákňování

OBSAH
ZOZNAM PREDNÁŠOK A POSTEROV PODĽA SEKCIÍ

Plenárna prednáška 67

FROM BASIC SCIENCE TO ADVANCES IN MEDICINE
Ada Yonath 67

Pozvané prednášky 67

PP1 SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE
Miroslav Urban 67

PP2 HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH
Filip Bureš 67

PP3 ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY
Eva E. Wille 68

PP4 OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM
Vladimír Zeleňák 68

PP5 STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI
Miroslav Prokša 68

PP6 ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE
Igor Bodík 69

PP7 DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCHA KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY
Martin Bajus 69

PP8 NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ
David Lukáš, Pavel Pokorný, Petr Mikeš, Jiří Chvojka, Eva Košťáková, Lucie Vysloužilová, Julie Soukupová, Jana Bajáková, Filip Sanetrník, Jiří Chaloupek, Karel Pejchar 69

Prednášky - Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia 71

1P01 NMR SPECTROSCOPY OF SLOVAK TOKAJ WINE
L. Husáriková, K. M. Kaliňák, M. Mazúr 71

1P02 VÝHODY A ÚSKALÍ JEDNOTLIVÝCH KOKRYSTALIZAČNÍCH TECHNIK
Veronika Sládková, Bohumil Kratochvíl 71

1P03 POTENTIOSTATIC DEPOSITION OF DNA – A TECHNIQUE FOR THE DEVELOPMENT OF HIGH-THROUGHPUT METHODS FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE
Vlastimil Vyskočil, Marta Blašková, Zuzana Hrochová, Zuzana Jurečková, Klára Stávková, and Andrea Hájková 72

1P04 SPECTROSCOPIC STUDY OF CAMPTOTHECIN DERIVATIVE SN-38
Miroslava Bobeničová, Dana Dvoranová 72

1P05 VYUŽITÍ A CHARAKTERIZACE SAMOEMULGUJÍCÍCH SYSTÉMU S LÉČIVY
Lenka Seilerová, Bohumil Kratochvíl, Veronika Sieberová, Hana Brusová 73

1P06 ŠTÚDIUM DEGRADÁCIE BIOLOGICKY ODBÚRATEĽNÝCH KOVOVÝCH MATERIÁOV
Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Miriam Kupková, Monika Hrubovčáková, Andrea Fedorková, Andrea Morovská Turoňová 73

1P07 SEPARACE AMERICIA Z KONCENTRÁTU KYSELINY BORITÉ Z ODPARKY PRIMÁRNÍHO OKRUHU JADERNÉ ELEKTRÁRNY DUKOVANY
Pavel Bartl, Jana Šuľaková, Jan John, Ferdinand Šebesta 74

1P08 COPPER COMPLEXES WITH CYPROCONAZOLE SEPARATED USING ION MOBILITY
Jana Jaklová Dytrtová, Michal Jakl 74

1P09 LÍTIUM-SÍRA-$LiFePO_4$ NANOKOMPOZITNÝ KATÓDOVÝ MATERIÁL PRE Li/S BATÉRIE
Andrea Fedorková, Renáta Oriňáková, Marie Sedlaříková, Pedro Gómez-Romero 75

1P10 SOUVISLOST MEZI MIKROPORÉZNÍMI CHARAKTERISTIKAMI UHLÍKATÝCH ADSORBENTŮ A JEJICH SCHOPNOSTÍ ADSORBOVAT Pb(II) Z VODNÝCH ROZTOKŮ
Tomáš Zelenka, Jana Štefelová 75

1P11 FOTOINDUKOVANÁ SYNTÉZA HEXAGONÁLNÍHO OXIDU ZINEČNATÉHO
Lenka Procházková, Václav Čuba 76

1P12 ZABEZPEČENÍ KVALITY VÝSLEDKŮ VE VÝZKUMNÉ LABORATOŘI
David Milde 76

1P13 ZNAČENÍ DNA ELEKTROAKTIVNÍMI SKUPINAMI PRO BIOANALYTICKÉ APLIKACE
Miroslav Fojta, Medard Plucnara, Pavlína Vidláková, Jan Špaček, Aleš Daňhel, Petr Orság, Petra Horáková, Hana Pivoňková, Jana Balintová, Petra Ménová, Veronika Raindlová, Hana Macíčková-Cahová, Jan Riedl, Luděk Havran, Michal Hocek 77

1P14 NOVÉ METODY ELEKTROFORETICKÉHO STANOVENÍ NEUROTRANSMITERŮ
Petr Tůma, Klára Málková 77

1P15 OPTIMALIZACE MINERALIZAČNÍ METODY BIOLOGICKÝCH VZORKŮ S OBSAHEM NANOČÁSTIC STŘÍBRA BEZ POUŽITÍ MIKROVLNNÉHO MINERALIZÁTORU
Šárka Hradilová, Aleš Panáček, Robert Prucek, Libor Kvítek, Radek Zbořil 78

1P16 ELEKTROSEPARÁCIE NA MIKROČIPOCH A ICH APLIKAČNÝ POTENCIÁL V ENVIRO- A BIOANALÝZE
Marián Masár, Peter Troška, Ladislav Danč, Jasna Hradski, Drahoslava Kabátová, Katarína Uhlárová, Marína Rudášová, Róbert Bodor....78

1P17 POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PRO STANOVENÍ KONCENTRACE L-CYSTEINU A JEHO ENANTIOMERICKÉ ČISTOTY
Pavel Řezanka, Jakub Koktan, Hana Řezanková, Pavel Matějka, Vladimír Král....79

1P18 VÝVOJ A POUŽÍTÍ HPLC/MS METODY STANOVENÍ IBUPROFENU
Marek Mucha, Jiří Kalina, Adam Pukowiec....79

1P19 HODNOTENIE AKTIVITY NANOROZMERNÝCH KATALYZÁTOROV PYROLÝZNOU PLYNOVOU CHROMATOGRAFIOU
Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková , Branislav Erdelyi....80

1P20 STANOVENIE ZINKU V ODPADOCH Z GUMÁRENSKÉHO PRIEMYSLU ELEKTROCHEMICKOU ROZPÚŠŤACOU ANALÝZOU NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM
Eva Culková, Peter Tomčík, Jaroslav Durdiak, Ľubomír Švorc, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin, Ján Lokaj....80

1P21 ELEKTRICKÉ, TEPELNÉ A DYNAMICKO MECHANICKÉ VLASTNOSTI POLYMÉRNYCH KOMPOZITOV NA BÁZE LDPE A EXPANDOVANÉHO GRAFITU
Ján Kratochvíla, Zdenko Špitálský, Daniela Jochec Mošková, Radhouan Tlili, Abderrahim Boudenne, Igor Krupa....81

1P22 MERANIE ELEKTRICKEJ VODIVOSTI A XPS ŠTÚDIUM STARNUTIA POLYPYROLU
Jana Tabačiarová, Matej Mičušík, Pavol Fedorko, Mária Omastová....81

1P23 KINETIKA RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE NEIONIZOVANEJ KYSELINY AKRYLOVEJ VO VODNEJ FÁZE
Marek Stach, Anna Chovancová, Igor Lacík....82

1P24 STUDIUM VLIVU KONCENTRACE CHLORIDOVÝCH IONTŮ NA INTENZITU POVRCHOVÉHO ZESÍLENÍ RAMANOVA SIGNÁLU ZA POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA
Ariana Fargašová, Robert Prucek, Václav Ranc, Aleš Panáček, Libor Kvítek, Radek Zbořil....83

1P25 (SPEKTRO) ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM NOVÉHO ENERGETICKÉHO MATERIÁLU FOX-7
Ludmila Šimková, Jiří Klíma, Jiří Ludvík....83

1P26 KVANTIFIKACE VLIVU ROZPOUŠTĚDLA NA KINETIKU HYDROGENACE NITRILŮ
Kamila Procházková, Jiří Krupka, Nikola Ruhswurmová....84

1P27 STANOVENIE KONCENTRÁCIE INDIA ROZPÚŠŤACOU CHRONO–POTENCIOMETRIOU
Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František, Labuda Ján....84

1P28 FOTOAKTIVNÍ NANOVLÁKENNÉ MATERIÁLY
Mosinger Jiří, Henke Petr, Kubát Pavel....84

Prednášky - Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia 85

2P01 NOVÉ MOŽNOSTI ELEKTROLYTICKEJ PRÍPRAVY ŽELEZANOV Z TAVENÍN
Ján Híveš, Miroslav Gál, Marta Ambrová, Kamil Kerekeš 85

2P02 FLUORESCENT CARBON DOTS
Ondřej Kozák, Kateřina Holá, Kumara Kasibhatta Ramanatha Datta, Radek Zbořil 86

2P03 MIKROBIÁLNE OVPLYVNENÁ KORÓZIA ZINKOVÝCH POVLAKOV
Matilda Zemanová, Jana Vávrová, Ľudmila Krištofiková, Jana Kozánková 86

2P04 EXPERIMENTÁLNÍ A TEORETICKÉ STUDIUM ROVNOVÁHY SYSTÉMU Zn-Co-O
Michal Kamrádek, Jindřich Leitner 87

2P05 PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A STUDIUM ANTIMIKROBIÁLNÍCH VLASTNOSTÍ NANOKOMPOZITU AG/PDDA-KŘEMELINA
Aleš Panáček, Anna Balzerová, Robert Prucek, Václav Ranc, Renata Večeřová,Vendula Husičková, Jiří Pechoušek, Jan Filip, Radek Zbořil, Libor Kvítek 87

2P06 THE APPLICATION OF FILLERS BASED ON MODIFIED CLAY MATERIALS IN RUBBER COMPOUNDS
M. Pajtášová, D. Ondrušová, Z. Jankurová, K. Holcová, E. Jóna, J. Paliesková 88

2P07 SYNTÉZA A OVLIVNĚNÍ VLASTNOSTÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PŘÍRODNÍMI LÁTKAMI
Martin Sivera, Libor Kvítek, Aleš Panáček 88

2P08 PŘÍPRAVA A KATALYTICKÉ VLASTNOSTI NANOAG@MMT KOMPOZITNÍHO MATERIÁLU
Martina Karlíková, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Jan Filip, Jiří Pechoušek 89

2P09 RUBBER ADDITIVES, THEIR INFLUENCE ON RUBBER PROPERTIES AND ENVIRONMENTAL ASPECTS OF PRODUCTION
D. Ondrušová, M. Pajtášová, L. Špániková, S. Domčeková, M. Ďurčeková 89

2P10 THE NANOFILLERS ON THE BASIS OF NATURAL AND SYNTHETIC ZEOLITE AND THEIR INFLUENCE ON PROPERTIES OF THE RUBBER COMPOUNDS
Lenka Špániková, Darina Ondrušová, Slavomíra Domčeková, Mária Kopcová, Katarína Holcová 90

2P11 MAGNETICKÉ KOMPOZITY NA BÁZI BENTONITU A JEJICH STABILITA V KYSELÉM PROSTŘEDÍ
Martin Mucha.....90

2P12 HYBRIDNÍ AMINO-AMIDY - NOVÉ *N,N'*-CHELATUJÍCÍ LIGANDY PRO KOVY HLAVNÍCH SKUPIN
Hana Kampová, Emilie Riemlová, Jitka Klikarová, Vladimír Pejchal, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička91

2P13 KOMPLEXOTVORNÉ VLASTNOSTI OLIGONITROKALIX[4]ARENŮ
Alan Liška, Jiří Ludvík 91

2P14 KRYŠTÁLOVÉ ŠTRUKTÚRY A SPEKTRÁLNO-ŠTRUKTÚRNE KORELÁCIE V TETRAKYANIDOPLATNATANOCH MEDI
Martin Vavra, Ivan Potočňák 92

2P15 AMIDINAT VS. GUANIDINAT CÍNATÝ– OXIDACE A 4+1 OXIDATIVNÍ CYKLOADICE
Tomáš Chlupatý, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička 92

2P16 BIFUNKČNÍ β-DIKETIMINÁTOVÉ A ENANAMINONOVÉ KOMPLEXY KOVŮ
Roman Olejník, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička 93

2P17 LINEÁRNÍ A NELINEÁRNÍ PSEUDOHALOGENIDOVÉ DERIVÁTY BIS(CYKLOPENTADIENYL)TITANITÉ
M. Křižan, M. Erben, J. Vinklárek a Z. Padělková 94

2P18 MOLEKULOVÉ ROZPOZNÁVANIE MALÝCH BIOMOLEKÚL POMOCOU KOMPLEXU ZN^{2+}-CYKLÉN
Zuzana Vargová, Ingrida Rostášová, Katarína Györyová, Petr Hermann, Ivan Lukeš 94

2P19 FILLING THE GAPS - NOVEL SALTS OF HSO_3F SUPERACID
Tomasz Michalowski, Wojciech Grochala 95

2P20 PHOTOGENERATION OF CHARGE CARRIERS IN POLY(N-VINYLCARBAZOLE) DOPED WITH 2,4,7-TRINITROFLUORENONE AND TRIS(2-PHENYLPYRIDINE) IRIDIUM
Anna Stefaniuk, Jarosław Jung, Ireneusz Głowacki 96

2P21 PROTINÁDOROVĚ AKTIVNÍ PLATNATÉ KOMPLEXY S DERIVÁTY 7-AZAINDOLU
Pavel Štarha, Ján Vančo, Zdeněk Dvořák, Zdeněk Trávníček 96

2P22 STUDIUM KINETICKÝCH A TERMODYNAMICKÝCH VLASTOSTÍ KOVOVÝCH KOMPLEXŮ S MODIFIKOVANÝMI TETRAAZAMAKROCYKLICKÝMI LIGANDY
Radek Ševčík, Jakub Vaněk, Přemysl Lubal Zuzana Kotková, Jan Kotek, Petr Hermann 97

2P23 SYNTÉZA PEROVSKITŮ TYPU $BaSn_{1-x-y}Tb_xZr_yO_3$
Petra Luňáková, Miroslav Trojan, Jakub Trojan.....97

2P24 HYDROGEN BONDED MOLECULAR CRYSTALS - PROSPECTIVE NOVEL NLO MATERIALS
Ivan Němec, Irena Matulková, Michaela Fridrichová, Jana Mathauserová, Matouš Kloda, Petr Němec, Ivana Císařová 98

2P25 $CaSnSiO_5$ S PŘÍDAVKEM CHROMU
Marcela Zvonková, Jana Luxová, Jakub Trojan, Miroslav Trojan 98

2P26 SORPČNÉ VLASTNOSTI A KATALYTICKÁ AKTIVITA NOVÝCH ZLÚČENÍN TYPU METAL-ORGANIC FRAMEWORKS
Miroslav Almáši, Vladimír Zeleňák, Róbert Gyepes, Juraj Kuchár, Jiří Čejka 99

2P27 STUDY OF COPPER(II) THIOPHENECARBOXYLATE COMPLEXES WITH PYRIDINE AND METHYLPYRIDINE
Vladimír Kuchtanin, Jan Moncoľ, Peter Segľa.....99

2P28 STRUCTURAL VARIABILITY AND SUPRAMOLECULAR ISOMERISM OF COPPER(II) CARBOXYLATES WITH N-METHYLNICOTINAMIDE
Ján Moncoľ, Jozef Halaška, Zuzana Vasková.....100

Prednášky - sekcia 3: Organická chémia a polyméry.....101

3P01 TERMORESPONSIVNÍ POLYMERNÍ MICELY A NANOČÁSTICE: POTENCIÁLNÍ NOSIČE RADIOFARMAK
Martin Hrubý, Jan Kučka, Jiří Pánek, Hana Macková, Sergey K. Filippov, Anna Yu. Bogomolova, Ondřej Sedláček, Mariia Rabyk, Richard Hoogenboom, Bryn Monnery, Andrès Ciolino, Petr Štěpánek101

3P02 MODIFIKÁCIE GLYKOGÉNU, CIELENÉ NÁDOROVÉ DIAGNOSTIKUM, MAKROPORÉZNY SCAFFOLD
Miroslav Vetrík, Sergej Filippov, Ondrej Sedláček, Martin Přádný, Petr Štepánek, Martin Hrubý 101

3P03 CARBONYL SUBSTITUTED BITHIOPHENE DERIVATIVES – SPECTRAL STUDIES IN SOLUTION AND POLYMER MATRICES
Martin Danko, Anita Andicsová, Pavol Hrdlovič, Dušan Račko, Daniel Végh, Vladimír Lukeš.....102

3P04 HYDROGELY NA BÁZI KYS. HYALURONOVÉ A JEJICH VYUŽITÍ V TKÁŇOVÉM INŽENÝRSTVÍ
Lucie Wolfová, Martin Pravda, Julie Bystroňová, Vladimír Velebný 102

3P05 VLIV (H^3-ALLYL)-(H^5-CYKLOPENTADIENYL)-DIKARBONYLMOLYBDENATÉHO KOMPLEXU NA TVORBU FILMU OXOPOLYMERAČNĚ ZASYCHAJÍCÍHO POJIVA NÁTĚROVÉ HMOTY
O. Preininger,J. Honzíček,J. Vinklárek,M. Erben 103

3P06 EFFECT OF ALKYL SUBSTITUENTS ON SPECTROSCOPIC, REDOX AND STRUCTURAL PROPERTIES OF 2,5-BIS(2,2'-BITHIOPHENE-5-YL)-1,3,4-THIADIAZOLE
Kamil Kotwica, Ewa Kurach, Renata Rybakiewicz, Joanna Zapala, Marek Knor, Robert Nowakowski, David Djurado, Petr Toman, Jiri Pfleger, Małgorzata Zagórska and Adam Proń.....104

3P07 VYUŽITIE POLYADIČNEJ REAKCIE 2-OXAZOLÍNOV NA PRÍPRAVU POLYMÉROV SO ŠPECIFICKÝMI TERMICKÝMI VLASTNOSŤAMI
Juraj Kronek, Jozef Lustoň, Angela Kleinová, Ivica Janigová, Jan Nedbal, Helena Valentová 104

3P08 ŠTÚDIUM CYTOTOXICITY POLYMÉRNYCH MATERIÁLOV PRE VYUŽITIE V BIOMEDICÍNE
Zuzana Kroneková, Juraj Kronek, Gabriela Kolláriková, Vladislav Semak, Peter Kasák, Igor Lacík ..105

3P09 VĚTVENÍ SILNÝCH POLYELEKTROLYTŮ ZÍSKANÝCH KOPOLYMERIZACÍ VINYLOVÝCH A DIVINYLOVÝCH MONOMERŮ VE VODNÉM PROSTŘEDÍ. ^{1}H NMR ANALÝZA
Jiří Podešva, Jiří Spěváček, Pavel Kratochvíl, Miloš Netopilík.....106

3P10 COMBINATION OF CLICK CHEMISTRY AND CONTROLLED RADICAL POLYMERIZATION FOR SYNTHESIS OF ADVANCED POLYMER DRUG DELIVERY SYSTEMS
Michal Pechar, Robert Pola, Alena Braunová, Richard Laga, Karel Ulbrich 106

3P11 ACETYLACETONATES OF VARIOUS METALS AS EFFICIENT CATALYSTS OF THE POLYMERIZATION OF L-LACTIDE INITIATED WITH MACRODIOLS
Anna Kundys, Andrzej Plichta, Anita Jóźwiak, Zbigniew Florjańczyk.....107

3P12 NOVÉ SPIROCYKLY NA BÁZE AKRIDIN-9-YLMETYLAMÍNU
Ján Imrich, Mária Vilková, Marianna Prokaiová 107

3P13 SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ ÚČINNOSŤ TAKRIN-KUMARINOVÝCH ANALÓGOV AKO POTENCIÁLNYCH LIEČIV ALZHEIMEROVEJ CHOROBY.
Slávka Hamuľaková, Katarína Špilovská, Martina Hrabinová, Ladislav Janovec, Kamil Kuča, Ján Imrich....108

3P14 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA JASPÍNU B A JEHO ANALÓGOV
Eva Mezeiová, Miroslava Martinková, Dominika Jacková, Jozef Gonda....108

3P15 SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE SMĚROVANÉHO KONJUGÁTU ISONIAZIDU S MAGNETICKÝMI NANOČÁSTICEMI
Miloš Sedlák,Dattatry Bhosale, Jiří Palarčík, Aleš Imramovský....109

3P16 1,2,4-DITHIAZOLY JAKO ÚČINNÁ SULFURIZAČNÍ ČINIDLA P(III) SLOUČENIN
Jiří Hanusek, Oleksandr Ponomarov....110

3P17 PYRIDINYL-IMIDAZOLIDINONY JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY HENRYHO REAKCE
Pavel Drabina, Miloš Sedlák....110

3P18 DEVELOPMENT OF GENERIC APIS: (-)-EZETIMIBE AND (-)-TAPENTADOL
Josef Hájíček....111

3P19 VYUŽITÍ SLOUČENIN HYPERVALENTNÍHO JÓDU V ASYMETRICKÉ ORGANICKÉ SYNTÉZE
Martin Kamlar, Jan Veselý....111

3P20 SYNTÉZA, VLASTNOSTI A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH KYNURÉNOVÝCH KYSELÍN
Kristína Plevová, Jana Jarčušková, Viktor Milata, Jela Mistríková....112

3P21 CERITÉ KATIONTY JAKO ÚČINNÝ KATALYZÁTOR SYNTÉZ ZA ÚČASTI SLOUČENIN S KARBONYLOVOU A OBDOBNOU FUNKČNÍ SKUPINOU [1]
Pavel Pazdera, Eva Havránková, Dana Němečková....112

3P22 PŘÍMÁ N^1-MONOSUBSTITUCE NA PIPERAZINU
Dana Němečková, Pavel Pazdera....113

3P23 RASTLINNÉ A ŽIVOČÍŠNÉ TOXÍNY OKOLO NÁS.
Miroslav Kríž....114

3P24 NANOMECHANICKÉ VLASTNOSTI EXTRUDOVANEJ PLA FÓLIE POVRCHOVO MODIFIKOVANEJ VZDUŠNOU A ARGÓNOVOU PLAZMOU
M. Valentin , A. Skarmoutsou , M. Omastová , C.A. Charitidis , I. Krupa....114

3P25 THE REINFORCING EFFECT OF ALTERATIVE FILLER IN RUBBER COMPOUNDS
Slavomíra Domčeková, Darina Ondrušová, Lenka Špániková, Zuzana Jankurová....114

3P26 SYNTHETIC POLYMER ADJUVANTS AS NOVEL IMMUNOSTIMULANTS FOR VACCINATION PURPOSES
Richard Laga, Geoffrey M. Lynn, Petr Chytil, Gray Kueberuwa, Anna Lagová, Michal Pechar, Robert Pola, Tomáš Etrych and Len W. Seymour....115

3P27 ANTIBACTERIAL POLYETHYLENE PREPARED BY PLASMA TREATMENT
Igor Novák, Anton Popelka, Ivan Chodák, Milena Špírková, Angela Kleinová, Vladimír Vanko....115

3P28 DYNAMICKÉ VLASTNOSTÍ POLYELEKTROLYTŮ V ZÁVISLOSTI NA DIELEKTRICKÉ KONSTANTĚ ROZPOUŠTĚDLA A VELIKOSTI PROTIIONTU
Petr Štěpánek, Sergey K. Filippov, Thomas A.P. Seery, Peter Černoch, Martin Hrubý, Jaroslav Kříž, Jiří Pánek....116

Prednášky - sekcia 4: Vyučovanie a história chémie 117

4P01 KVALITNÝ A INOVATÍVNY UČITEĽ V ŠKOLE DNEŠKA A BUDÚCNOSTI
Mgr. Katarína Javorová, PhD., doc. RNDr.Beáta Brestenská, PhD., Mgr. Martin Šponiar....117

4P02 JAK ZVÝŠIT ZÁJEM STUDENTŮ STŘEDNÍCH ŠKOL O STUDIUM PŘÍRODOVĚDNÝCH OBORŮ?
Ludmila Zajoncová....117

4P03 POPULARIZÁCIA CHÉMIE NA GYMNÁZIU PAVLA HOROVA V MICHALOVCIACH
Beáta Semková....117

4P04 AKTIVITY NA GYMNÁZIU VILIAMA PAULINYHO TÓTHA V MARTINE V OBLASTI CHÉMIE
Jana Tavelová....118

4P05 BUDÚCNOSŤ CHEMICKEJ OLYMPIÁDY NA SLOVENSKU
Juraj Malinčík....118

4P06 CHÉMIA PRE CHEMIKOV VERZUS CHÉMIA PRE NECHEMIKOV? MÔŽE BYŤ OBSAH PREDMETU CHÉMIA ROZDIELNY NA RÔZNYCH STREDNÝCH ŠKOLÁCH?
Ján Reguli....118

4P07 SCIFINDER A REAXYS - POROVNÁNÍ DVOU NEJDŮLEŽITĚJŠÍCH CHEMICKÝCH BÁZÍ DAT
Jaroslav Šilhánek....119

4P08 EM3E – ZKUŠENOSTI S PŘÍPRAVOU A DVĚMA ROKY REALIZACE PROJEKTU ERASMUS MUNDUS
Ivona Sedlářová , Karel Bouzek, Vlastimil Fíla....119

4P09 VÝZNAMNÝ CHEMICI A VÝUČBA CHÉMIE
Milan Melicherčík, Danica Melicherčíková....120

4P10 VYDAVATEĽSKÁ ČINNOSŤ SLOVENSKEJ CHEMICKEJ SPOLOČNOSTI OD ROKU 1948 DO ROKU 2013
Michal Uher, Viktor Milata....120

4P11 ANGLICKÝ CHEMIK J. G. F. DRUCE (1894 – 1950) A JEHO VZŤAH K ČESKOSLOVENSKU
Ján Čaplovič....121

Prednášky - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia..... 121

5P01 ELIMINÁCIA AKRYLAMIDU V SUŠIENKACH APLIKÁCIOU ASPARAGINÁZY
Zuzana Ciesarová, Kristína Kukurová, Lucie Marková, Ján Fencl....121

5P02 CEREAL-BASED FOOD PRODUCTS AND THEIR ROLE IN THE PREVENTION OF CIVILISATION DISEASE
Lucia Mikušová, Ernest Šturdík 122

5P03 CHELATUJÍCÍ MAKROPORÉZNÍ MIKROČÁSTICE JAKO POTRAVINOVÝ DOPLNĚK PRO LÉČBU WILSONOVY CHOROBY
Mattová Jana, Větvička David, Hrubý Martin, Kučka Jan, Králová Jaromila, Poučková Pavla, Zadinová Marie, Škodová Michaela, Vetrík Miroslav, Petřík Miloš, Nový Zbyněk, Beneš Jiří 122

5P04 SYNTETICKÉ SUBSTRÁTY HYDROXYCINAMOYLESTERÁZ PRE SCREENING A BIOKATALÝZU
Vladimír Mastihuba, Mária Mastihubová, Andrej Chyba 123

5P05 CHEMIKÁLIE Z POTRAVINÁRSKEJ BIOMASY
Stanislav Sekretár, Lenka Tmáková, Jarmila Hlásniková, Lenka Vrbiková, František Kreps, Štefan Schmidt 123

5P06 VPLYV OBALOVÉHO MATERIÁLU NA OXIDAČNÚ STABILITU TUKOV PRI ICH OHREVE
Jarmila Hlásniková, Tatiana Cimermanová, Stanislav Sekretár, Lenka Tmáková, Lenka Vrbiková, Štefan Schmidt 124

5P07 VPLYV RAFINÁCIE REPKOVÉHO OLEJA NA OBSAH TOKOFEROLOV
František Kreps, Štefan Schmidt, Jan Kyselka, Vladimír Filip 124

5P08 SLEDOVANIE ZMIEN V OXIDAČNEJ STABILITE SLNEČNICOVÝCH OLEJOV
Lenka Vrbiková, Štefan Schmidt, František Kreps, Lenka Tmáková, Jarmila Hlásniková, Stanislav Sekretár 125

5P09 VÝZNAM POTRAVINÁRSKYCH TUKOV VO VÝŽIVE ČLOVEKA
Štefan Schmidt 125

5P10 ALTERNATÍVNE ZDROJE RASTLINNÝCH OLEJOV Z BIOMASY
Štefan Schmidt, Lenka Vrbiková, František Kreps, Lenka Tmáková, Jarmila Hlásniková, Stanislav Sekretár 125

5P11 VYUŽITÍ FLOKULANTŮ MODIFIKOVANÝCH HUMINOVÝCH KYSELIN PRO ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD
Iveta Musilová, Tomáš Weidlich, Petr Mikulášek 126

5P12 VYUŽITÍ SORBENTŮ PŘI ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY BARVIV
Hana Polednová, Tomáš Weidlich, Petr Mikulášek 126

5P13 REDUKTIVNÍ DEHALOGENACE VE VODNÉM ROZTOKU JAKO METODA BEZPEČNÉ DEGRADACE HALOGENOVANÝCH AROMATICKÝCH SLOUČENIN
Tomáš Weidlich, Lenka Krchová, Lubomír Prokeš 126

5P14 NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE ODPADNÍCH A PROCESNÍCH ODPADNÍCH VOD – MOŽNOSTI A OMEZENÍ ELEKTRO-FENTONOVY REAKCE
Libor Dušek, Lukáš Balcar, Barbora Horňáková 127

5P15 NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE VYBRANÝCH AMINO–ANTRACHINONOVÝCH A KATIONAKTIVNÍCH BARVIV
Barbora Horňáková, Libor Dušek, Ladislav Novotný, Jaromíra Chýlková, Lenka Bandžuchová 128

5P16 POROVNÁNÍ ÚROVNĚ ZNEČIŠTĚNÍ U ZÍSKANÝCH FILTRÁTŮ ZE SRÁŽENÍ REAKTIVNÍCH BARVIV IONTOVÝMI KAPALINAMI NA ZÁKLADĚ SROVNÁNÍ UKAZATELŮ $CHSK_{CR}$, BSK_5 A AOX
Jana Martinková, Tomáš Weidlich, Petr Mikulášek 128

5P17 KONTAMINACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NA SLOVENSKU ZPŮSOBENÁ ČINNOSTÍ SOVĚTSKÉ ARMÁDY
Ivan Mašek, Dušan Vičar 128

5P18 DEVASTACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NĚKTERÝCH ÚZEMÍ STŘEDNÍHO SLOVENSKA SOVĚTSKOU ARMÁDOU A SOUČASNÁ REALIZOVANÁ OPATŘENÍ
Zdeněk Šafařík, Dušan Vičar 129

5P19 SLEDOVANIE POVRCHOVO AKTÍVNYCH VLASTNOSTÍ FYTOCHEMIKÁLIÍ ZO ZDROJOV BIOMASY
Lenka Tmáková, Stanislav Sekretár, Jarmila Hlásniková, Lenka Vrbiková, Štefan Schmidt 129

Prednášky - sekcia 6 CHEMPROGRESS..... 130

6P01 TERMICKÉ KRAKOVANIE POLYALKÉNOVÝCH ODPADOV
Boris Jambor, Elena Hájeková, Martin Bajus 130

6P02 OPTIMALIZACE KINETICKÝCH PARAMETRŮ PYROLÝZY UHLOVODÍKŮ VE ZOBECNĚNÉM MATEMATICKÉM MODELU
Petr Zámostný, Adam Karaba, Natália Olahová, Jiří Petrů, Jan Patera, Elena Hájeková, Martin Bájusa Zdeněk Bělohlav 130

6P03 VODÍKOVÁ EKONOMIKA A JEJÍ ROLE V ENERGETICE
Karel Bouzek , Martin Paidar.....131

6P04 POROVNÁNÍ STABILITY PLATINOVÝCH A PLATINUM-KOBALTOVÝCH KATALYZÁTORŮ PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY TYPU PEM
Jakub Mališ, Luis Cesar Colmenares Rausseo, Svein SundeKarel Bouzek 131

6P05 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ PROCESU VÝROBY VODÍKU VYSOKOTEPLOTNÍ ELEKTROLÝZOU VODNÍ PÁRY
Roman Kodým, Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek 132

6P06 ETHERIFICATION OF GLYCEROL BY TERT.BUTYL ALKOHOL IN FLOW REACTOR
Andrej Turan, Dušan Mravec, Alexander Kaszonyi 132

6P07 KINETICS STUDY OF THE REACTION OF GLYCEROL AND UREA TO GLYCEROL CARBONATE
László Seemann, Alexander Kaszonyi, Lívia Lépesová 133

6P08 PD-BI NANOPARTICLES FOR OXIDATION OF BIOGLYCEROL IN FIXED-BED REACTOR
Stanislav Vajíček, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi.....133

6P09 INDIUM PROMOTED COPPER AND NICKEL BASED CATALYSTS FOR HYDROGENOLYSIS OF GLYCEROL
Andrej Ševčík, Alexander Kaszonyi 134

6P10 SELECTIVE CATALYTIC OXIDATION OF BIOMASS-DERIVED ALKANE TO ALKOHOL AND ALDEHYDE
Veronika Hergelová, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi 134

6P11 MECHANISMUS POVRCHOVÝCH REAKCÍ PROBÍHAJÍCÍCH PŘI HYDROGENACI NITRILŮ NA KOVOVÝCH KATALYZÁTORECH
Jiří Krupka 135

6P12 OPTIMALIZACE PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S KATEXOVOU MEMBRÁNOU
Karel Vazač, Martin Paidar, Martin Roubalík, Karel Bouzek 135

6P13 ELEKTROCHEMICKÁ SYNTÉZA ŽELEZANU S VYUŽITÍM INERTNÍ ANODY
Martin Prokop, Tomáš Bystroň, Karel Bouzek 136

6P14 STUDIUM ROVNOMĚRNOSTI DISTRIBUCE ELEKTRICKÉHO PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE
Michal Němeček, Roman Kodým, David Tvrzník, Karel Bouzek, Dalimil Šnita 136

6P15 VLIV VYBRANÝCH PARAMETRŮ NA IONTOVOU VODIVOST YSZ ELEKTROLYTU
Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek 137

6P16 VLIV KAPALNÉHO ELEKTROLYTU NA PROVOZNÍ VLASTNOSTI ANION SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO ELEKTROLYTU V PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY
Jaromír Hnát, Martin Paidar, Jan Schauer, Karel Bouzek 137

6P17 AKTIVITY ČESKÉ ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY
Petra Šulcová, Jiří Málek 138

6P18 IZOLACE THALLIA A JEHO SLOUČENIN Z ODPADNÍCH VOD
Ladislav Kudrlička, Jiřina Čežíková Petr Pistulka, Vladimír Plucha, Martin Paidar, ...138

6P19 IN-SITU CHARAKTERIZACE KYSLÍKOVÝCH SENZORŮ V PROSTŘEDÍ EUTEKTIKA PbBi
Jan Vít, Lukáš Košek, Fosca Di Gabriele 139

Postery - sekcia 1 Analytická a fyzikálna chémia 139

1Po01 VYUŽITIE NEIÓNOVÉHO TENZIDU TRITONU X-114 NA EXTRAKCIU A SKONCENTROVANIE STOPOVÝCH MNOŽSTIEV MEDI
Simona ČURMOVÁ, Lenka OKENICOVÁ a Radoslav HALKO 139

1Po02 INFLUENCE OF SURFACTANT STRUCTURE ON BIODEGRADATION
Anna Dabrowska 140

1Po03 BASE VOLTAMMETRIC CHARACTERIZATION OF PHENYLAZIDE MODIFIED DEOXYCYTIDINE – THE POTENTIAL DNA REDOX LABEL ENABLING ITS POST-SYNTHETIC MODIFICATIONS BY „CLICK-REACTIONS“
Aleš Daňhel, Zuzana Trošanová, Jana Balintová, Luděk Havran, Michal Hocek, Miroslav Fojta 140

1Po04 VOLTAMPÉROMETRICKÉ ŠTÚDIUM PD/C KATALYZÁTORA PRE HYDROGENÁCIE V KVAPALNEJ FÁZE
Silvia Demčáková, Mária Heželová, Ľubomír Pikna 141

1Po05 QCM – JEDNODUCHÝ NÁSTROJ PRE DETEKCIU A SLEDOVANIE KONFORMAČNÝCH ZMIEN BIOMOLEKÚL NA PEVNÝCH POVRCHOCH
Viktor Gajdoš, Ján Labuda 141

1Po06 FOURIER - TRANSFORM ANALYSIS OF CW-EPR SPECTRUM OF COPPER(II)-HISTIDINE (1:2) COMPLEX IN MOBILE PHASE. DISCRIMINATION OF NITROGEN SUPERHYPERFINE COUPLING CONSTANTS.
Lukáš Gaľa, Marián Valko 142

1Po07 FLOW-MODULATED COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL GAS CHROMATOGRAPHY WITH SIMULTANEOUS FLAME IONIZATION AND QUADRUPOLE MASS SPECTROMETRIC DETECTION
Roman Gorovenko, Jan Krupcik, Ivan Spanik 142

1Po08 NANOŠTRUKTÚRY NA BÁZE TIOLOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV NA POVRCHU SKLA
Soňa Halászová, Monika Jerigová, Dušan Velič 143

1Po09 CHEMICKÁ IONIZACE ZA ATMOSFÉRICKÉHO TLAKU PŘI NÍZKÝCH PRŮTOCÍCH VZORKU
Ondřej Hejnar, Volodymyr Pauk, Andreea Maria Iordache, Karel Lemr 143

1P**o**10 COVALENT BINDING OF CISPLATIN IMPAIRS THE FUNCTION OF NA^+/K^+-ATPASE BY BINDING TO ITS CYTOPLASMIC PART.
Miroslav Huličiak, Jan Vacek, Marek Šebela, Eva Orolinová, Joanna Znaleziona, Marika Havlíková, Martin Kubala 144

1Po11 STANOVENÍ Si VE VZORCÍCH ORGANICKÝCH PIGMENTŮ METODOU FL-AAS
Lenka Husáková, Iva Urbanová, Tomáš Faltys, Tomáš Kratochvíl, Vlasta Lišková, Jitka Šrámková ..145

1Po12 STANOVENÍ MIDAZOLAMU V KRÁLIČÍ PLAZMĚ METODOU GC-NPD A HPLC-UV PO NAZÁLNÍ A KONJUNKTIVÁLNÍ APLIKACI
Martin Jaček, Jana Matějčková, Jiří Málek, Ladislav Hess, Eva Samcová 145

1Po13 ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL SKLENÝCH POVRCHOV A POVRCHOVÝCH ORGANICKÝCH NANOŠTRUKTÚR
Eduard Jáné, Daniel Repovský,Tibor Pálszegi, Dušan Velič 146

1Po14 MEASUREMENT OF CLAY MINERALS BY THE VIBRATIONAL SPECTROSCOPY
Jana Josieková 146

1Po15 STANOVENÍ POMĚRU ENANTIOMERŮ L- A D-CYSTEINU POMOCÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA
Jakub Koktan, Pavel Řezanka, Pavel Matějka, Vladimír Král 147

1Po16 STUDIUM FYZIKÁLNĚ CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ BINÁRNÍCH SYSTÉMŮ VODA-PEG
Zdeňka Kolská, Petra Parobková, Vladimír Henych, Petr Valha, Monika Benkocká, Václav Švorčík .147

1Po17 VLASTNOSTI A VÝSKYT ISOSTRUKTURNÍCH ŘAD SOLVÁTŮ
Iva Koupilová, Michal Hušák, Bohumil Kratochvíl, Václav Eigner, Alexandr Jegorov 147

1Po18 MOŽNOSTI INSTRUMENTÁLNÍ FOTONOVÉ AKTIVAČNÍ ANALÝZY S POUŽITÍM MIKROTRONU MT-25
Ivana Krausová, Jiří Mizera, Zdeněk Řanda, Zbyněk Horák, David Chvátil, Pavel Krist 148

1Po19 VAZBA CISPLATINY NA CYTOPLAZMATICKOU ČÁST SODNO-DRASELNÉ ATPASY
Martin Kubala, Miroslav Huličiak, Marek Šebela, Eva Orolinová, Joanna Znalezionna, Marika Havlíková, Jan Vacek 149

1Po20 DETERMINATION OF TRICLOSAN AT CARBON PASTE ELECTRODE USING DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRY
Jan Mika, Petra Mala, Edita Vranova, Jiri Barek, Jiri Zima, Hana Dejmkova.....149

1Po21 AKTIVAČNÍ ANALÝZA PŘI STUDIU TEKTITŮ A IMPAKTOVÝCH SKEL
Jiří Mizera, Zdeněk Řanda 150

1Po22 VYUŽITÍ EXPERIMENTU PŘI VÝUCE VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE
Karel Musil, Vlastimil Dohnal.....150

1Po23 VYUŽITÍ PENCIL GRAFITOVÝCH ELEKTROD (PeGE) PRO STANOVENÍ PURINŮ
Rudolf Navrátil, František Jelen, Libuše Trnková 150

1Po24 CHIRÁLNÍ SEPARACE SOLIFENACINU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU S VYUŽITÍM DERIVÁTŮ CYKLODEXTRINU JAKO CHIRÁLNÍCH SELEKTRORŮ
Klára Navrátilová, Pavel Řezanka, Helena Ryšavá, Vladimír Král 151

1Po25 URČOVANIE HYPERPOLARIZOVATEĽNOSTI MOLEKÚL METÓDOU HYPER-RAYLEIGHOVHO ROZPTYLU
E. Noskovičová, D. Lorenc, D. Velič.....151

1Po26 BIS-TRÖGER BASES MOLECULAR TWEEZER COMPLEXES – UNCOVERING INTERACTION ORIGIN
Václav Parchaňský, Milan Jakubek, Vladimír Král, Bohumil Dolenský 152

1Po27 VELMI RYCHLÉ ELEKTROFORETICKÉ STANOVENÍ KREATININU A KYSELINY MOČOVÉ V LIDSKÉ MOČI POMOCÍ SPOJENÍ DVOU KAPILÁR O RŮZNÝCH VNITŘNÍCH PRŮMĚRECH
Václav Pavlíček, Petr Tůma a Eva Samcová 152

1Po28 VYUŽITÍ TECHNIKY DIFUZNÍHO GRADIENTU V TENKÉM FILMU PRO MONITOROVÁNÍ LABILNÍCH CHEMICKÝCH FOREM RTUTI VE VODNÝCH VZORCÍCH
Pavlína Pelcová, Hana Dočekalová, Andrea Kleckerová.....153

1Po29 ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA DNA MINI-HAIRPINU d(GCGAGC)
Iveta Pilařová, Zdeňka Balcarová, Libuše Trnková 153

1Po30 STANOVENÍ VYBRANÝCH KOVŮ V KLINICKÝCH MATERIÁLECH PO REVIZNÍCH OPERACÍCH KLOUBNÍ NÁHRADY
Tomáš Pluháček, David Milde, Martin Kuba, Jiří Gallo.....154

1Po31 FOTOAKTIVÁCIA NA TENKOM FILME TIO_2 NA SKLE ZADNOU AKTIVÁCIOU UV SVETLOM
Michal Procházka, Monika Stupavská,Dušan Velič 154

1Po32 LASER ABLATION SYNTHESIS OF NEW GOLD ARSENIDES USING NANO-GOLD AND ARSENIC AS PRECURSORS. LDI-TOF MASS SPECTROMETRY AND SPECTROPHOTOMETRY
Lubomír Prokeš, Nagender Reddy Panyala, Milan Alberti, Eladia María Peña-Méndez, Jose Elias Condeand Josef Havel.....155

1Po33 „NORMÁLNE“ ANOMÁLNE VLASTNOSTI VODY
Ladislav Rábara 155

1Po34 STANOVENIE RUTÉNIA V RÔZNORODÝCH KVAPALNÝCH MÉDIÁCH POUŽITÍM ATÓMOVEJ ABSORPČNEJ SPEKTROMETRIE S VYSOKÝM ROZLÍŠENÍM, KONTINUÁLNYM ZDROJOM ŽIARENIA A ATOMIZÁCIOU V GRAFITOVEJ PECI (HR-CS GFAAS)
Dagmar Remeteiová, Miroslava Smrčová, Silvia Ružičková 156

1Po35 ATOMIC FORCE MICROSCOPY OF POLYTHIOPHENE/FULLERENE COMPOSITE FILMS
D. Repovský, D. Velič 156

1Po36 VLIV TENZIDŮ NA SORPCI NAFTOLOVÉ ZELENĚ B NA NEDOPALU
Lucie Ruppenthalová, Lucie Bartoňová.....157

1Po37 ETV-ICP-OES METÓDA PRI STOPOVEJ ANALÝZE NOSIČOVÝCH KATALYZÁTOROV NA BÁZE PD/C: ŠTÚDIUM VYPAROVANIA
Silvia Ružičková, Dagmar Remeteiová, Miroslava Smrčová, Miroslava Hámborská.....157

1Po38 OPTIMALIZÁCIA PRÍPRAVY BIOSENZORA NA DETEKCIU ETANOLU POUŽITÍM MIKROBIÁLNEHO BIONANOKOMPOZITU
Jana Šefčovičová, Jaroslav Filip, Peter Gemeiner, Ján Tkáč 158

1Po39 OPTIMALIZÁCIA PODMIENOK PREKONCENTRÁCIE VYBRANÝCH ŤAŽKÝCH KOVOV Z VODNÝCH ROZTOKOV S VYUŽITÍM UHLÍKOVÝCH NANORÚROK PRED ICH STANOVENÍM METÓDOU FAAS
Jana Semančíková, Dagmar Remeteiová 158

1Po40 MODELING OF THE MIGRATION OF NANOPARTICLES FROM PACKAGING TO FOOD
Peter Šimon, Marian Valko.....159

1Po41 VYUŽITIE STRIEBROM MODIFIKOVANÝCH TLAČENÝCH ELEKTRÓD PRE NEENZYMATICKÚ DETEKCIU CHOLESTEROLU
Lenka Škantárová, Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Alfredo de la Escosura Muñiz, Arben Merkoçi159

1Po42 VLIV REDOX POTENCIÁLU NA ODSTRAŇOVÁNÍ MĚĎNATÝCH IONTŮ POMOCÍ NANOČÁSTIC KOVOVÉHO ŽELEZA
Petr Slovák, Jan Čuda, Šárka Hradilová, Jan Filip, Karolína Machalová Šišková, Radek Zbořil.....160

1Po43 FORENZNÉ STOPY STRELIVÍN NA ODTLAČKOCH PRSTOV V HMOTNOSTNÝCH SPEKTRÁCH
Lenka Slušná, Dušan Velič, Monika Stupavská.....160

1Po44 VYUŽITIE HR-CS AAS V ANALYTICKEJ KONTROLE RECYKLÁCIE VYBRANÝCH HYDROGENAČNÝCH KATALYZÁTOROV
Miroslava Smrčová, Dagmar Remeteiová, Silvia Ružičková 161

1Po45 CHARAKTERIZACE UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI CELULÓZY PROSTŘEDNICTVÍM ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ Z VODNÉ FÁZE
Jana Štefelová 162

1Po46 CHARACTERIZATION AND SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTRAL TESTING OF ACTIVES SURFACES BASED ON CHLORIDE-MODIFIED AG NANOPARTICLES
Veronika Sutrová, Ivana Šloufová, Blanka Vlčková.....162

1Po47 STUDY OF Ge-As-Se CHALCOGENIDE GLASSES USING LASER DESORPTION IONISATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY
Katarína Švihlová, Lubomír Prokeš, Milan Alberti , Petr Němec, and Josef Havel 163

1Po48 POROVNÁVACIE ŠTÚDIUM BOROM- DOPOVANÉHO DIAMANTU S INÝMI UHLÍKOVÝMI MATERIÁLMI PRE IMOBILIZÁCIU DNA
Jana Svítková, Ľubomír Švorc a Ján Labuda 163

1Po49 ČASOVO ROZLÍŠENÁ FEMTOSEKUNDOVÁ SPEKTROSKOPIA KOMPLEXU KUMARÍN/CYKLODEXTRÍN
Marianna Trenčanová[1], Dušan Velič 164

1Po50 STANOVENÍ Ag VE VZORCÍCH POPELA FOTOGRAFICKÉHO FILMU METODOU FL-AAS
Iva Urbanová, Lenka Husáková, Pavla Židová, Tomáš Kratochvíl, Jitka Šrámková.....164

1Po51 DUÁLNÍ SENZOR PRO STANOVENÍ BIOLOGICKY VÝZNAMNÝCH ANIONTŮ
Jakub Vaněk, Přemysl Lubal, Petr Hermann, Iveta Pilařová, Libuše Trnková 165

1Po52 SLEDOVÁNA ORGÁNOVÉ DISTRIBUCE NANOČÁSTIC STŘÍBRA POMOCÍ ICP-MS
Lenka Veverková, Šárka Hradilová, David Milde 165

1Po53 FUNKČNÉ STRIEBORNÉ NANO–ŠTRUKTÚROVANÉ POVRCHY PRE VYUŽITIE V SENZOROCH
Zuzana Orságová Králová, Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková, Lenka Škantárová, Jozef Radoňák.....166

Postery - sekcia 2 Anorganická a materiálová chémia.....167

2Po01 DISKONTINUÁLNÍ TITRACE
Mgr, Rostislav Adam , Ing. Barbora Drtinová, PhD., doc. Ing. Karel Štamberg, CSc. 167

2Po02 VLIV ZPŮSOBU PŘÍPRAVY NA BAREVNOST PEROVSKITOVÝCH PIGMENTŮ NA BÁZI DOPOVANÉHO $SRSNO_3$
Lucie Adolfová, Žaneta Dohnalová, Petra Šulcová, Aneta Burkovičová 167

2Po03 NANOFLUORIDY VZÁCNÝCH ZEMIN - PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI
Vilém Bartůněk, Jakub Rak, Jiřina Junková, Martina Mezlíková, Zdeněk Sofer 168

2Po04 SYNTÉZA WOLFRAMANOVÝCH PREKURZORŮ SRÁŽENÍM A REAKCÍ V PEVNÉ FÁZI
Petr Bělina, Veronika Machalíková, Petra Šulcová 168

2Po05 STRUKTURNÍ STUDIE HOŘEČNATÝCH KOMPLEXŮ AMIDINATŮ V ROZTOKU (^{1}H A ^{13}C NMR) A PEVNÉ FÁZI (^{13}C CP/MAS NMR A XRD)
Michal Bílek, Tomáš Chlupatý, Jiří Brus, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička 168

2Po06 ^{19}F-MRI RELAXAČNÍ ČINIDLA NA BÁZI KOMPLEXŮ DVOJMOCNÉHO NIKLU
Jan Blahut, Jan Kotek, Petr Hermann 169

2Po07 CLAY MINERAL/PORPHYRIN HYBRID SYSTEMS: FROM CHARACTERIZATION TO APPLICATION
Alexander Čeklovský, Shinsuke Takagi 169

2Po08 MĚĎNATÉ KOMPLEXY PRO RADIOMEDICÍNU – RYCHLE KOMPLEXUJÍCÍ DERIVÁTY CYKLAMU
Tomáš David, Vojtěch Kubíček, Petr Hermann, Ivan Lukeš 170

2Po09 SONOCHEMICKÉ SRÁŽENÍ OXIDŮ A FOSFOREČNANŮ LANTHANOIDŮ A URANU
Iaroslav Doroshenko, Jana Žůrková, Jiří Pinkas* 170

2Po10 HYDRATOVANÉ CEMENTY A CA-SI-AL HYDRÁTY; OD TERMOANALYTICKÝCH EFEKTOV K ENTALPII
Milan Drábik, Ľubica Gáliková, Eva Špyrková, Eva Scholtzová 171

2Po11 NAJNOVŠÍ VÝVOJ V OBLASTI MAKRO-DEFEKT-FREE (MDF) MATERIÁLOV (PREHĽAD)
Milan Drábik, Ľubica Gáliková, Barbara Kosednar-Legenstein, Gunther Maier 171

2Po12 NOVÉ ŠKORPIONÁTOVÉ LIGANDY OBSAHUJÍCÍ NENASYCENÉ FOSFOROVÉ ATOMY
Milan Erben, Libor Dostál, Zdeňka Padělková 172

2Po13 PRÍPRAVA ANORGANICKÝCH NOSIČOV ZO SERPENTINITU
Alena Fedoročková , Agnesa Doráková 172

2Po14 DTA-TG INVESTIGATION OF K_2ZRF_6
Zuzana Vasková, Eva Špyrková, Blanka Kubíková, Veronika Gurišová, Miroslav Boča 173

2Po15 PRÍPRAVA, SPEKTRÁLNE A TERMICKÉ VLASTNOSTI 4-AMINOBENZOÁT–ZINOČNATÝCH KOMPLEXOV
Katarína Homzová, Katarína Györyová 174

2Po16 DUSIČNAN DRASELNÝ – HNOJIVO PRE HYDROPONICKÉ APLIKÁCIE
Jana Jurišová, Vladimír Danielik, Pavel Fellner, Jana Gabčová, Milan Králik 174

2Po17 MODIFIKACE BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY V PLAZMATICKÉM VÝBOJI
Kateřina Kolářová, Markéta Píšlová, Vladimíra Vosmanská, Václav Švorčík 175

2Po18 POLYMERACE ε–KAPROLAKTONU POMOCÍ GUANIDINÁTŮ CÍNATÝCH
Martina Líbalová, Tomáš Chlupatý, Aleš Růžička 175

2Po19 SYNTÉZA PEROVSKITU TYPU $Ba(Sr)SnO_3$ DOPOVÁNÉ TERBIEM
Petra Luňáková, Miroslav Trojan, Jakub Trojan 175

2Po20 NANOČÁSTICE ZLATA PŘIPRAVENÉ METODOU LPPS
Libor Mastný, Monika Vilémová, Vlastimil Brožek 176

2Po21 METODIKA TESTOVÁNÍ MĚDĚNÉHO POVLAKU OCELOVÉHO JÁDRA VODIČE
Libor Mastný, Renáta Slavětínská 176

2Po22 DETERMINATION OF THE REDOX ACTIVITY OF CHOSEN AMINO ACIDS BY CYCLIC VOLTAMMETRY
Kristína Matelková, Roman Boča, Juraj Hudák,Wolfgang Linert 177

2Po23 FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA $BIVO_4$ A JEHO KOMPOZITOV S TIO_2
Robert Michal, Mária Čaplovičová, Gustav Plesch 178

2Po24 NANOSTRUKTUROVÁNÍ PLLA LASEROVÝM SVAZKEM A PLAZMATEM
Iva Michaljaničová, Petr Slepička, Nikola Slepičková Kasálková, Petr Sajdl, Václav Švorčík 178

2Po25 PŘÍPRAVA A STUDIUM REAKTIVITY LITHNÝCH KOMPLEXŮ ASYMETRICKÝCH AMIDINÁTŮ
Martin Novotný, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička 179

2Po26 BIFUNKČNÍ CHELATANTY PRO SELEKTIVNÍ KOMPLEXACI MĚDI
Monika Paúrová, Jan Kotek, Petr Hermann 179

2Po27 CHARACTERIZATION OF GYPSUM FROM QUARRY KOBEŘICE (CZECH REPUBLIC)
Plevová Eva, Konečný Pavel, Vaculíková Lenka, Kožušníková Alena, Peterková Janka 180

2Po28 STUDIUM KINETIKY KOMPLEXACE ZIRKONIA S DTPA A DFO
Miroslav Pniok, Jan Kotek, Vojtěch Kubíček, Petr Hermann 180

2Po29 CYCLEN-BASED EUROPIUM(III) COMPLEXES AS LUMINESCENT RECEPTORS
Soňa Procházková, Jan Kotek, Vojtěch Kubíček and Petr Hermann 181

2Po30 POLYMÉRNE KABOXYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY SO 4-PYRIDÍNMETANOLOM – PRÍPRAVA A VLASTNOSTI
Miroslava Puchoňová, Zuzana Vaskova, Jan Moncol, Marián Koman, Milan Mazúr, Dušan Valigura 181

2Po31 ŠTÚDIUM KOMPLEXOTVORNÝCH VLASTNOSTÍ AMINOMETYL–FOSFÍNOVÝCH KYSELÍN V ROZTOKU
Ingrida Rostášová, Zuzana Vargová, Katarína Györyová, Peter Hermann, Ivan Lukeš 182

2Po32 ŽÍHÁNÍ ZLATÝCH NANOVRSTEV ZA PROMĚNNÉHO TLAKU
Jakub Siegel, Ondřej Kvítek, Alena Řezníčková, Václav Švorčík 182

2Po33 PEN - EXCELENTNÍ KANDIDÁT PRO TVORBU PERIODICKÝCH NANOSTRUKTUR
Petr Slepička, Oldřich Neděla, Nikola Slepičková Kasálková, Petr Sajdl, Martin Veselý, Václav Švorčík 183

2Po34 UHLÍKOVÉ VRSTVY A NANOSTRUKTURY NA PLLA
Nikola Slepičková Kasálková, Martin Lenz, Petr SlepičkaVáclav Švorčík 183

2Po35 STUDY OF CHEMICAL AND MORPHOLOGICAL MODIFICATIONS OF MICA TREATED WITH ATMOSPHERIC PRESSURE SURFACE BARRIER DISCHARGES
Vadym Prysiazhnyi, Monika Stupavská, Mirko Černák 184

2Po36 GENERÁCIA NANOČASTÍC KOVOV A ANORGANICKÝCH ZLÚČENÍN V IÓNOVÝCH KVAPALINÁCH.
Štefan Toma, Peter Lobotka, Ivo Vávra.....185

2Po37 KASITERITOVÁ VIOLEŤ
Jakub Trojan, Lucie Karolová, Jana Luxová, Petra Luňáková, Marcela Zvonková.....185

2Po38 PRÍPRAVA, VLASTNOSTI A ANTIUREÁZOVÁ AKTIVITA MEĎNATÝCH KOMPLEXOV SCHIFFOVÝCH ZÁSAD
Jindra Valentová, Marek Matuška, Zita Puterová, Ferdinand Devínsky.....186

2Po39 ŠTRUKTÚRNE A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI HEUSLEROVEJ ZLIATINY NIMNSB
Zuzana Vargová, Tomáš Ryba, Rastislav Varga, Sergej Ilkovič, Marian Reiffers, Róbert Gyepes, ...186

2Po40 VLIV DOPUJÍCÍCH PRVKŮ NA ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL RUTILOVÝCH PIGMENTŮ $(Ti,Cr,M)O_2$
Jan Večeřa, Petra Šulcová, Petr Mikulášek.....187

2Po41 PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA VANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ S BIPYRIDINY
J. Vinklárek, D. Stříbrná,J. Honzíček, Z. Padělková.....187

2Po42 DEPOZICE KOLOIDNÍCH ČÁSTIC NA POVRCHU SYNTETICKÉHO POLYMERU (ZEONOR) A SKLA POMOCÍ METODY IMPINGING JET
Jakub Vlček, Lubomír Lapčík, Jiří Čech.....188

2Po43 MODIFIKACE OXIDOVANÉ CELULÓZY V PLAZMATICKÉM VÝBOJI
Vladimíra Vosmanská, Kateřina Kolářová, Silvie Rimpelová, Václav Švorčík 188

2Po44 PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTIC SLITINY CU-AG
Vít Vykoukal, Aleš Stýskalík, David Škoda, Ondřej Zobač, Jiří Sopoušek, Jan Vřešťál,Jiří Pinkas*...189

2Po45 SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND MAGNETIC PROPERTIES OF NANOSIZED COBALT CHROMITE
Dominika Zákutná, Daniel Nižňanský, Anton Repko, Irena Matulková, A. Ardu, Carla Cannas, Jana Vejpravová.....190

2Po46 MODIFIED PHOTOACTIVE POLYSTYRENE NANOFIBERS.
Petr Henke, Pavel Kubát, Jiří Mosinger.....190

2Po47 PREPARATION AND PROPERTIES OF $CD_XZn_{1-X}S$ AND CORE/SHELL CdS/ZnS NANOPARTICLES
Petr PRAUS, Ladislav SVOBODA 191

Postery - sekcia 3 Organická chémia a polyméry.....192

3Po01 SHAPE CONTROL OF GOLD NANOPARTICLES IN ORGANIC SOLUTION
Monika Benkovičová, Peter Šiffalovič, Mário Kotlár, Matej Jergel, Eva Majková.....192

3Po02 SYNTHESIS, STRUCTURE AND REACTIVITY OF 3,4-DIBENZOYLTHIOPHENES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS
Jana Boržíková, Jozef Kožíšek and Daniel Végh,.....192

3Po03 PD (II) KATALYZOVANÁ SPIROCYKLIZÁCIA INDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU BRASINÍNU A JEHO 1-SUBSTITUOVANÝCH DERIVÁTOV
Mariana Budovská 193

3Po04 VLIV BOTNÁNÍ HYDROGELŮ HYALURONANU NA JEJICH MECHANICKÉ VLASTNOSTI
J. Bystroňová, L. Wolfová, M. Pravda, V. Velebný 193

3Po05 BIOLOGICAL EFFECTS OF MEDICINAL PLANTS USED IN TRADITIONAL MEDICINE FOR RESPIRATORY DISEASES
Peter Capek, Martina Šutovská, Soňa Fraňová, Jozef Turjan, Ján Kozák.....194

3Po06 PORFYRIN-STEROIDNÍ SLOUČENINY PRO VRSTVY LANGMUIRA-BLODGETOVÉ
Lenka Cardová, Raffaella Lettieri, Mariano Venanzi, Pavel Drašar.....194

3Po07 NÁVRH A SYNTÉZA DERIVÁTOV BITIAZOLU URČENÝCH PRE OFET N-TYPU
Ľuboš Cehlárik, Peter Magdolen.....195

3Po08 RÔZNE IZOMÉRNE BENZOBISTIAZOLOVÉ SOLI AKO POTENCIÁLNE NLO MATERIÁLY
Alexandra Čibová, Peter Magdolen 195

3Po09 SYNTHESIS OF TETRAZOLE DERIVATIVES WITH PROMISING ANTIMYCOBACTERIAL EFFECT
Patrik Čonka, Jaroslav Roh, Alexandr Hrabálek.....195

3Po10 SYSTEMATICKÁ MODIFIKACE Π-KONJUGOVANÉ CESTY V PUSH-PULL CHROMOFORECH S *N,N´*-DIBUTYLBARBITUROVOU KYSELINOU JAKO AKCEPTOREM
Milan Klikar,*Daniel Cvejn, Filip Bureš 196

3Po11 SYNTÉZA NOVÝCH POTENCIÁLNÍCH INHIBITORŮ PROTEASOMU NA BÁZI TRIPEPTIDŮ
Jan Dušek, Aleš Imramovský, Radek Jorda, Eva Řezníčková, Vladimír Kryštof, Miloš Sedlák.....196

3Po12 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA INDOLIZIDÍNOVÝCH IMINOSACHARIDOV Z D-GLUKÓZY
Ján Elečko, Miroslava Martinková, Jozef Gonda.....197

3Po13 ORGANOKATALYTICKÁ MICHAELOVA ADÍCIA V SYNTÉZE OSELTAMIVIRU A JEHO ANALÓGOV
Viktória Hajzer, Július Durmis, Radovan Šebesta 198

3Po14 VISUALIZATION OF FLUORESCENT-LABELED CARBON-BASED NANOPARTICLES IN A POLYMER MATRIX
Markéta Ilčíková, Martin Danko, Jaroslav Mosnáček, Zdenko Špitálský, Mikhail Doroshenko, Kaloian Koynov.....198

3Po15 MODIFIKÁCIA VLASTNOSTÍ KOMPOZITOV NA BÁZE POLYAMIDU GAMA ŽIARENÍM
Ivica Janigová, Mária Porubská, Dragan Babič, Klaudia Jomová, Ivan Chodák, Miroslav Šlouf.....199

3Po16 VLIV *N*-ARYLSULFONYL-1,2-DIFENYLETYLEN-1,2-DIAMINOVÉHO LIGANDU V NOYORIHO TYPU KATALYZÁTORU NA PRŮBĚH ASYMETRICKÉ TRANSFER HYDROGENACE IMINŮ
Jakub Januščák, Ondřej Matuška, Marek Kuzma, Petr Kačer.....199

3Po17 FLUORESCENČNÍ DERIVÁTY TRILOBOLIDU A JEJICH BIOLOGICKÝ PROFIL
Michal Jurášek, Silvie Rimpelová, Eva Kmoníčková, Pavel Drašar and Tomáš Ruml 200

3Po18 SYNTÉZA A PŘESMYK SUBSTITUOVANÝCH *S*-(1-BENZOFURAN-2(3*H*)-ON-3-YL) ISOTHIOURONIUM-BROMIDŮ
Richard Kammel, Jiří Hanusek 200

3Po19 SYNTHESIS, BIOLOGICAL ASSESSMENT AND MOLECULAR MODELING OF NOVEL TACRINE-7-METHOXYTACRINE HETERODIMERS FOR ALZHEIMER DISEASE TREATMENT
Jan Korabecny, Slavka Hamulakova, Ladislav Janovec, Zuzana Gazova, Katarina Siposova, Lukas Gala, Marian Valko, Kamil Kuca 201

3Po20 WARFARÍN – JEHO SYNTÉZA A VLASTNOSTI
Eva Milatová, Viktor Milata, Daniel Végh 202

3Po21 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA PREKURZOROV SALINOSPORAMIDU A A CINNABARAMIDU A Z D-XYLÓZY A D-ARABINÓZY
Margaréta Kováčová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda 202

3Po22 ÚČINNOST POLYMERNĚ VÁZANÝCH STABILIZÁTORŮ V POLYSTYRE–NOVÝCH PLASTECH
Jana Kovářová, Jiří Podešva 203

3Po23 SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH FENOLICKÝCH KARBAMÁTŮ
Martin Krátký, Jarmila Vinšová, Jiřina Stolaříková.....203

3Po24 PŘÍPRAVA A IN VITRO STUDIE CHELATUJÍCÍCH MIKROČÁSTIC PRO TERAPII WILSONOVY CHOROBY
Kučka J., Hrubý M., Škodová M., Vetrík M., Mattová J., Poučková P., Zadinová M. 204

3Po25 POVRCHOVÁ MORFOLOGIE PLAZMATICKY MODIFIKOVANÉHO A NÁSLEDNĚ TEPELNĚ NAMÁHANÉHO PLLA
Ondřej Kvítek, Lenka Buřičová, Petr Slepička, Václav Švorčík.....204

3Po26 2,2-DIMETYL-5-((2-ETYLHYDRAZINYL)METYLEN)-1,3-DIOXANE-4,6-DION: PRÍPRAVA A ŠTRUKTÚRA
Ján Lokaj, Ján Moncoľ, Viktor Milata and Denisa Tarabová 205

3Po27 SYNTÉZA HAPTENŮ ODVOZENÝCH OD POHLAVNÍCH HORMONŮ
Ondřej Longin, Ivan Černý, Pavel Drašar.....205

3Po28 8-AZA-7,9-DIDEAZAXANTHINOVÉ NUKLEOSIDY
David Mařák, Miroslav Otmar, Marcela Krečmerová 206

3Po29 DEVELOPMENT OF NOVEL QUATERNARY DETERGENTS AS PART OF DECONTAMINATION AND DISINFECTION MEANS
Marek, J., Soukup, O.; Cabal, J. Kuca, K. 206

3Po30 PRÍPRAVA KOMPOZITOV NA BÁZE ELASTOMÉRNEJ MATRICE A UHLÍKOVÝCH NANOTRUBIČIEK PRE SENZORICKÉ APLIKÁCIE
Jana Tabačiarová, Matej Mičušík, Jürgen Pionteck, Mária Omastová 207

3Po31 PYRIDINIUM BETAINY JAKO AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH
David Miklík, Filip Bureš 207

3Po32 NOVEL AND RE-EVALUATED ACTIVITIES IN THE SERIES OF N-ALKYLATED-TACRINE DERIVATIVES: SYNTHESIS, BIOLOGICAL EVALUATION AND MOLECULAR MODELING
Jan Korabecny , Eugenie Nepovimova , Ladislav Janovec , Anna Horova , Filip Zemek , Kamil Musilek , Katarina Spilovska , Kamil Kuca 208

3Po33 INVESTIGATION OF BEECH WOOD MODIFIED BY RADIO-FREQUENCY PLASMA
Igor Novák, Anton Popelka, Vladimír Vanko,Ivan Chodák, Jozef Preťo, Mária Šivová 208

3Po34 MICRO-WAVE ASSISTED SYNTHESIS OF ALKOXYPHENYLIMIDAZOLES
Jan Pérko, Patrik Pařík 209

3Po35 CÍLENÁ SYNTÉZA DERIVÁTŮ 2-HYDROXY-*N*-[(2S)-1-OXO-1-(FENYLAMINO)ALK-2-YL]BENZAMIDŮ
Karel Pauk, Aleš Imramovský, Jiří Hanusek , Vladimír Pejchal 209

3Po36 KOMPLEXY PALADIA OBSAHUJÍCÍ CHIRÁLNÍ BENZTHIAZOLOVÉ LIGANDY
Vladimír Pejchal, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička 210

3Po37 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA 1-[(1*R*)-1-(6-FLUOR-1,3-BENZTHIAZOL-2-YL)ETHYL]-3-SUBSTITUOVANÝCH FENYL AMIDŮ
Marcela Pejchalová, Vladimír Pejchal, Zdeňka Padělková.....210

3Po38 TERMORESPONZIVNÍ HYBRIDNÍ MATERIÁLY GLYKOGEN-GRAFT-POLY(2-ALKYL-2-OXAZOLIN) PRO BIOMEDICINSKÉ POUŽITÍ
Aneta Pospíšilová, Martin Hrubý, Markéta Jirátová, Jan Kovář.....211

3Po39 ŠTÚDIUM OXIDAČNÉHO ŠTIEPENIA C=C DVOJITEJ VÄZBY SUBSTRÁTOV VYCHÁDZAJÚCICH Z KYSELINY ŠIKIMOVEJ PRI SYNTEÉZE 3-DEOXY-2-ULOZONOVÝCH KYSELÍN
Miroslav Psotka, Jozef Gonda, Miroslava Martinková 211

3Po40 VLIV KLIMATICKÝCH PODMÍNEK NA MECHANICKÉ VLASTNOSTI VLÁKEN Z HYALURONANU SODNÉHO
Jolana Ščudlová, Jiří Běťák, Tomáš Pitucha, Vladimír Velebný 212

3Po41 STŘÍBRNÉ MONOLITICKÉ HPLC KOLONY PRO VAZBU RADIOAKTIVNÍHO JÓDU
Ondřej Sedláček, Jan Kučka, František Švec, Martin Hrubý 213

3Po42 VYUŽITIE ALKYLOXYACETALDEHYDOV V ENANTIOSELEKTÍVNEJ SYNTÉZE MEDZIPRODUKTOV OSELTAMIVIRU
Pavol Tisovský, Mária Mečiarová, Radovan Šebesta 213

3Po43 SYNTÉZA KONJUGÁTŮ PORFYRINŮ S TRILOBOLIDEM
Pavla Tomanová, Michal Jurášek, Pavel Drašar 213

3Po44 STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA HYBRIDNÝCH MOLEKÚL ODVODENÝCH OD SPIROINDOLÍNOVÝCH FYTOALEXÍNOV A BETULÍNOV
Lucia Tomášová, Mária Vilková, Jan Šarek, Mariana Budovská, Jozef Gonda 214

3Po45 SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A APLIKACE OPTICKY ČISTÝCH DERIVÁTŮ IDAZOLINŮ V ASYMETRICKÉ KATALÝZE
Jiří Tydlitát, Filip Bureš, Jiří Kulhánek.....214

3Po46 VÝVOJ RUTHENIOVÝCH KOMPLEXŮ S NHC-LIGANDY KATALYZUJÍCÍCH ANTI-MARKOVNIKOVSKOU HYDRATACI TERMINÁLNÍCH ALKYNŮ
Jiří Vavřík, Martin Kindl, Marek Kuzma, Stanislav Rádl, Petr Kačer.....215

3Po47 SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES OF CROSS-CONJUGATED DIENONES DERIVED FROM N-BENZYLPIPERIDONE AND THIENYLALDEHYDES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS
Daniel Végh, Jana Boržíková, Peter Tisovský, Jozef Krajčovič, Michaela Halinkovičová, Viktor Milata and Štefan Marchalín 216

3Po48 SYNTÉZA TRISUBSTITUOVANÝCH DERIVÁTOV AKRIDÍNU AKO NOVÝCH ANTIPROLIFERATÍVNYCH LÁTOK
Mária Vojtičková, Ladislav Janovec, Ján Imrich 216

3Po49 KYANOVODÍK V CHEMII FRAGNANCÍ
Karel Zelinka, Jan Šimbera 217

3Po50 MODIFIKACE FARMAKOFORŮ TRILOBOLIDU
Tomáš Zimmermann, Michal Jurášeka Pavel Drašar.....217

Postery - sekcia 4 Vyučovanie a história chémie 218

4Po01 MOTIVAČNÉ PREPOJENIE MINULOSTI A SÚČASNOSTI – DIDAKTICKÝ PRÍKLAD BERGAKADÉMIE A RASTRUJÚCEJ SONDOVACEJ MIKROSKOPIE V NANOTECHNÓLOGII
Ján Goruška, Dušan VeličJán Benko, Daniel Repovský 218

4Po02 HISTORIE A SOUČASNOST CHEMICKÉ OLYMPIÁDY
Marta Klečková, Klára Černá 218

4Po03 OPTIMALIZACE E-LEARNINGOVÉ PLATFORMY MOODLE PRO VÝUKU CHEMIE
Martin Mastný, Jan Horníček, Miroslav Šimek 218

4Po04 INOVACE PODKLADŮ PRO LABORATORNÍ CVIČENÍ Z ORGANICKÉ CHEMIE
Michal Novotný, Rostislav Radvan,Magdalena Herrmannová.....219

4Po05 POPULARIZACE CHEMIE V RÁMCI PROJEKTU BRAVO NA UNIVERZITĚ PARDUBICE
Patrik Pařík, Dagmar Holubcová, Petr Bělina.....219

4Po06 VÝBRANÁ TÉMATA PRO VÝUKU CHEMIE – SÉRIE VÝUKOVÝCH MATERIÁLŮ PRO BUDOUCÍ UČITELE CHEMIE
Jana Prášilová, Marta Klečková, Jiří Kameníček.....220

4Po07 ZAVEDENÍ ÚLOHY SPEKTROFOTOMETRICKÉ STANOVENÍ AKTIVITY PANKREATICKÉ LIPÁZY, STANOVENÍ OPTIMÁLNÍHO PH
Šárka Štěpánková 221

4Po08 INOVACE BAKALÁŘSKÉHO STUDIJNÍHO OBORU APLIKOVANÁ CHEMIE CZ.1.07/2.2.00/15.0247
Petr Suchomel, Libor Kvítek, Tomáš Sýkora, Taťjana Nevěčná 221

4Po09 VYUŽITIE EFEKTNÝCH POKUSOV VO VÝUKE FYZIKÁLNEJ CHÉMIE
Alena Uhríková, Rostislav Radvan,Magdalena Herrmannová 221

Postery - sekcia 5 Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia 222

5Po01 POLYFOSFÁTKINÁZY A ICH APLIKÁCIE V BIOTECHNOLÓGII
Lucia Achbergerová, Jozef Nahálka 222

5Po02 VPLYV PODMIENOK NA CITLIVOSŤ MIKROORGANIZMOV KU ŽIARENIU
Jaroslav Červenák, Viliam Múčka, Václav Čuba 223

5Po03 DECORATION OF IRON-OXIDE NANOPARTICLES BY BIOMOLECULES.
I.Capek, P.Capek and Z.Hloušková. 223

5Po04 ELEKTROCHEMICKÉ ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD
Barbora Horňáková, Libor Dušek, Evelína Erbanová 224

5Po05 FOTOSTABILITA CIS IZOMERŮ LUTEINU
Barbora Hrvolová, Jiří Kalina 224

5Po06 IMMOBILIZATION OF LACCASE ON MAGNETIC CARRIERS AND ITS BIOTECHNOLOGICAL APLICATION
Miroslav Jořenek and Ludmila Zajoncová 225

5Po07 RETENCE CU(II) A CD(II) POMOCÍ OXYHUMOLITU Z VODNÝCH ROZTOKŮ OBSAHUJÍCÍCH TAKÉ FOSFÁTY
Hana Kohutová, Bruno Kostura 225

5Po08 OXIME ACETYLCHOLINESTERASE REACTIVATORS WITH 3-OXAPENT-1,5-DIYL LINKER – SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION
Musilek, K.; Kasparek, A.; Kunes, M.3, Horova, A.; Herman, D.; Krenkova, Z.; Jun, D.; Kuca, K. 226

5Po09 SROVNÁNÍ ÚROVNĚ ZNEČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD NA ZÁKLADĚ POROVNÁNÍ UKAZATELŮ BSK_5 A $CHSK_{CR}$
Jana Martinková, Tomáš Weidlich, Petr Mikulášek 226

5Po10 STANOVENÍ MOLEKULOVÝCH HMOTNOSTÍ KERATINOVÝCH HYDROLYZÁTŮ
Pavel Mokrejš, Ondřej Krejčí, Svatopluk Sukop 226

5Po11 ODSTRAŇOVÁNÍ CHROMANŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ
Michal Němeček, Helena Parschová, Petra Šlapáková 227

5Po12 VERIFICATION OF THE NORM TV 75 7536 (CONTENT OF HUMIC SUBSTANCES IN WATER) BY SOLUTIONS OF FULVIC AND HUMIC ACIDS
František Novák, Martina Šestauberová, Miroslav Krtička 228

5Po13 INVESTIGATION OF ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF PHOSPHATIDYLCHOLINE-CHOLESTEROL MIXTURE IN MODEL PHOSPHOLIPID MEMBRANES USING ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE SPECTROSCOPY
Kateřina Nováková, Tomáš Navrátil, Ivana Šestáková, Vladimír Mareček, Jaromíra Chýlková 228

5Po14 PŮSOBENÍ VYBRANÝCH VLIVŮ NA ELEKTRODETEKCI OLEJŮ A PŘÍPADNÝCH IONTŮ VE VODÁCH
Ladislav Novotný 229

5Po15 VLIV PŮVODU AKTIVOVANÉHO KALU NA PROCES DENITRIFIKACE
Jiří Palarčík, Jana Vlačihová, Evelína Erbanová, Miloslav Slezák 229

5Po16 POLYFRIEND: ADVANCED BIO-FRIENDLY POLYMERS
Jaroslav Mosnáček, Béla Iván, Eva Papajová 229

5Po17 STANOVENÍ SEMICHRONICKÝCH TOXICIT U SALÁTU A CIBULE, VČETNĚ AKUTNÍ TOXICITY NA NITĚNKÁCH PRO 1,4-FENYLENDIAMIN
Jiří Pavlovský, Alena Ondrůšová 230

5Po18 VYBRANÉ IONTOVÉ A SOUVISEJÍCÍ VLIVY PŘI POTENCIOMETRII IONTŮ STŘÍBRA
Ladislav Novotný, Renáta Petráňková, Abraham Kabutey 231

5Po19 ODSTRAŇOVÁNÍ URANU Z VODNÝCH ROZTOKŮ
Hana Porschová, Petra Šlapáková, Helena Parschová 231

5Po20 ZÁVISLOST TECHNOLOGICKÝCH PARAMETRŮ NA TEXTURNÍCH A CHEMICKÝCH VLASTNOSTECH KOKSŮ
Jana Serenčíšová, Jiřina Vontorová, Zdeněk Klika, Alena Kožušníková 232

5Po21 TOXIC METALS AND CELL WALL POLYSACCHARIDES
Zuzana Vatehová, Anna Malovíková, Anna Kákošová, Karin Kollárová, Danica Kučerová, Desana Lišková 232

Postery - sekcia 6 CHEMPROGRESS..... 233

6Po01 MOLECULAR STRUCTURE EFFECTS IN DEGRADATION BY VAPOUR PHASE HYDROGEN PEROXIDE IN COMBINATION WITH UV RADIATION (UV/VPHP PROCESS)
Jiří Kovářík, Martin Novák, Alena Nováková, Barbora Ďurčiová, Petr Kačer 233

6Po02 VYUŽITÍ MODIFIKÁTORŮ PH PRO DOSAŽENÍ PH-NEZÁVISLÉHO DISOLUČNÍHO PROFILU SLABĚ BAZICKÉHO LÉČIVA Z MATRICOVÝCH TABLET
Eliška Mašková, Kateřina Dvořáčková, Jan Muselík, Petr Doležel 233

6Po03 PYROLÝZA BINÁRNÍCH SMĚSÍ C4 A C6 UHLOVODÍKŮ
Jiří Petrů, Petr Zámostný, Zdeněk Bělohlav 234

6Po04 ROZPOUŠTĚNÍ DOLOMITU VE ZŘEDĚNÝCH ROZTOCÍCH KYSELINY SÍROVÉ
Martin Pultar, Ivona Sedlářová , Jan Vídenský 234

6Po05 HYDROGENACE NITRILŮ NA KOVOVÝCH KATALYZÁTORECH V PLYNNÉ FÁZI
Nikola Ruhswurmová, Jiří Trejbal 234

6Po06 ROVNOVÁHA KAPALINA-PÁRA V SYSTÉMU ANILIN, N-METHYLANILIN A N,N-DIMETHYLANILIN
Jiří Trejbal, Rudolf Pospíšil, Martin Zapletal 235

6Po07 VLIV VÝBĚRU POLYMERU NA RYCHLOST UVOLŇOVÁNÍ NYSTATINUZ MUKOADHEZIVNÍCH FILMŮ MATRICOVÉHO TYPU
Markéta Valtusová, Hana Landová, David Vetchý, Jan Gajdziok 235

6Po08 FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI SODNÉ SOLI KARBOXYMETHYLCELULOSY V TEXTILNÍ PODOBĚ
Lenka Vinklárková, Ruta Masteiková, Tomáš Sopuch 236

6Po09 VLIV POMOCNÝCH LÁTEK NA VLASTNOSTI A DISOLUČNÍ PROFIL LIQUISOLID SYSTÉMŮ
Barbora Vraníková, Jan Gajdziok, Aleš Franc, David Vetchý, Veronika Czerneková, Ivana Wawrzyczková, Aneta Faltýnková, Monika Fileková 236

Autorský index 237

Program prednášok 246

PLENÁRNA PREDNÁŠKA

FROM BASIC SCIENCE TO ADVANCES IN MEDICINE

Ada Yonath

Department of Structural Biology, Weizmann Institute, Rehovot 76100, Israel

Ribosomes, the universal cellular machines that translate the genetic code into proteins, are targeted by many antibiotics that paralyze them by binding to their various functional sites. Owing to the determination of the atomic structures of eubacterial ribosomes in comlex with antibiotics, their binding modes, inhibitory actions and synergism pathways have been deciphered for almost all ribosomal antibiotics. These indicated the principles of differentiation between patients and pathogens, suggested mechanisms leading to bacterial resistance and paved ways for improvement of existing antibiotics as well as for the design of advanced therapeutics capable of minimizing antibiotics resistance.

POZVANÉ PREDNÁŠKY

PP1
SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE

Miroslav Urban

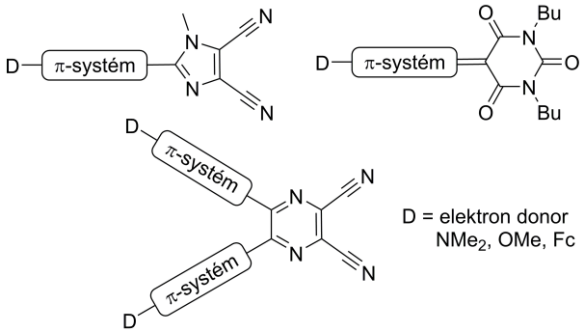
PP2
HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH

Filip Bureš

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, filip.bures@upce.cz

Funkcionalizované organické π-konjugované systémy jsou v posledních letech rozsáhle studovány jako vhodné materiály pro optoelektronická zařízení typu OLED, OPVC, DSSC nebo OFET. V π-konjugovaných sloučeninách opatřených navíc elektron donory (D) a akceptory (A) bude π-systém díky přímé D-A interakci výrazně polarizován a molekula nabude dipolární charakter. V těchto push-pull nebo D-π-A systémech dochází k vnitřnímu přenosu náboje (ICT) z donoru na akceptor za vzniku chinoidního uspořádání. ICT je rovněž primárně odpovědný za nelineárně optické (NLO) vlastnosti organických materiálů. Elektron akceptory a donory typu CN/NO_2 a R_2N/RO skupiny jsou nejčastěji aplikované A a D části běžných push-pull chromoforu, nicméně v poslední době jsou rovněž využívány některé pěti- a šestičlenné heterocyklické sloučeniny. Začlenění heterocyklické sloučeniny do π-systému push-pull chromoforu má za následek zvýšení jeho chemické a termické odolnosti a heteroatomy mohou v závislosti na orientaci vůči zbytku molekuly rovněž fungovat jako elektron donory či akceptory. V přednášce bude pojednáno o designu, přípravě, vlastnostech a dalším využití takovýchto push-pull chromoforů. Pozornost bude věnována především D-π-A chromoforům s akceptorními jednotkami na bázi pětičlenného imidazolu [1] a šestičlenného pyrimidinu (kyselině barbiturové)

[2] a pyrazinu [3] a to buď v lineárním nebo zkříženém uspořádání (Obr. 1).



Obr. 1 Vybrané heterocyklické akceptorní jednotky na bázi imidazolu, pyrimidintrionu a pyrazinu

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (13-01061S a P106/12/0392) a Technologickou agenturou České republiky (TE01020022, Flexprint).

[1] J. Kulhánek, F. Bureš, *Beilstein J. Org. Chem.* **2012**, *8*, 25.
[2] M. Klikar, F. Bureš, O. Pytela, T. Mikysek, Z. Padělková, A. Barsela, S. Achelle, *New. J. Chem.* **2013**, zasláno.
[3] F. Bureš, H. Čermáková, J. Kulhánek, M. Ludwig, W. Kuznik, I. V. Kityk, T. Mikysek, A. Růžička, *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, 529.

PP3
ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY

Eva E. Wille

Vice President & Executive Director, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

PP4
OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

Vladimír Zeleňák

PP5
STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

Miroslav Prokša

Katedra didaktiky prírodných vied, psychológie a pedagogiky, PriF UK, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, proksa@fns.uniba.sk

Didaktický systém je živý fenomén, ktorý podlieha dynamickým zmenám. Faktory, ktoré tieto zmeny podmieňujú môžeme rozdeliť do troch skupín:

- ciele, požiadavky a podmienky, ktoré určuje spoločenská prax,
- didaktická teória,
- reflexia predchádzajúcich faktorov učiteľskou komunitou.

V našom príspevku si postupne všimneme všetky tri faktory a uvedieme ich smerovanie v aktuálnej situácii nášho didaktického systému.

Z pohľadu spoločenskej praxe sa zameriame hlavne na reflexiu výsledkov školskej reformy z pred štyroch rokov, stav učebníc chémie súvisiacich s reformou, pripravovanú revíziu reformy z pohľadu vývojových trendov vyučovania chémie na základných a stredných školách.

V ďalšej časti budeme analyzovať aktuálne smerovanie didaktickej teórie. Svoju pozornosť sústredíme predovšetkým na možnosti uplatňovania projektového vyučovania, IBSE, na podporu experimentálnej činnosti v rámci školských chemických pokusov meracími zariadeniami, digitalizáciu vyučovania chémie, na fenomén učebných úloh z pohľadu spätnej väzby a hodnotenia výsledkov vyučovania chémie.

Naznačíme aj niektoré postrehy o vnímaní vývojových trendov školskej praxe vyučovania chémie učiteľskou komunitou.

Na záver by som chcel poďakovať Slovenskej chemickej spoločnosti za pozvanie na 65. zjazd chemikov a vysloviť presvedčenie, že rokovanie v rámci tohto tradičního podujatia prinesie nové impulzy do zlepšovania nášho didaktického systému v oblasti vyučovania chémie.

PP6
ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

Igor Bodík

PP7
DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCHA KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

Martin Bajus

Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie, Oddelenie technológie ropy a petrochémie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, martin.bajus@stuba.sk

Druhá generácia biopalív na rozdiel od prvej generácie je založená na a) komplexnom spracovaní a využití rastlinných surovín so zameraním na b) „nepotravinárske“ trvalé plodiny, akými sú predovšetkým drevná biomasa, vysoké trávnaté porasty, trvalky, lignocelulózové zvyšky a odpady. Z procesov na premenu lignocelulózových rastlinných surovín prichádzajú úvahy: tepelné a katalytické krakovanie, pyrolýza, splynovanie, karbonizácia, katalytický a parný reforming, hydrotermálne skvapalňovanie, Fischer-Tropschova syntéza, hydro-dehydrogenácia, hydrokrakovanie, hydrogenačná rafinácia, kyslá hydrolýza a dekarboxylácia. Hlavným zameraním budúcich biorafinácií je vyrábať vysoko-hodnotné nízkoobjemové chemikálie a lacné veľkotonážne pohonné hmoty aplikovaním vysoko-účinných procesov.

Výroba biopalív využitím termochemických spôsobov poskytuje veľmi širokú paletu potecionálnych technológií. V zásade sú možné dva prístupy : (i) priame skvapalňovanie na palivové náhrady alebo (ii) výroba vysokokvalitných syntetických palív zo syntézneho plynu získaného splynovaním biomasy. Priame skvapalňovanie by mohlo byť komerčne najdostupnejšie , pretože je založené len na jedinom kľúčovom procese. Na prvý pohľad sa to zdá byť jednoduché, s využitím lacných a malých výrobných zariadení. Avšak spaľovanie, napríklad pyrolýzneho oleja v motoroch s vnútorným spaľovaním a turbínach, vyžaduje vysoko štandardné palivá. Veľmi nízka kvalita získaných pyrolýznych olejov z dnešných procesov spracovania biomasy v porovnaní s uhľovodíkovými palivami z ropy a zemného plynu vyžaduje následne aplikáciu ďalších rafinačných a zušľachťujúcich procesov. Okrem toho výťažky a zloženie kvapalných produktov sa drasticky menia v dôsledku spracovania rozdielnych surovín. Toto tiež sťažuje štandardizáciu bioolejov získaných týmito spôsobmi.

Naproti tomu, splynovanie biomasy s následnou výrobou syntetických palív (motorová nafta, metanol, dimetyléter atď.) vyžaduje technológie, ktoré sú zložitejšie a drahšie než tie, ktoré sa používajú v komerčných rafinérskych procesoch alebo v súčasných procesoch priameho skvapalňovania biomasy.

Biooleje získané frakčnou destiláciou a po odvodnení pyrolýzneho oleja z odpadnej drevnej biomasy obsahujú menej než 0,2% alifatických uhľovodíkov a 0,4-0,5% hmot. aromátov. Neutrálnych oxygenátov, akými sú étery, estery, karbonyly a ich fenolové analógy, je prítomných 36-40% hmot. zo zmesí. Polárne zlúčeniny, akými sú alkoholy a organické kyseliny, sú zastúpené v množstve 55-58% hmot..

Pre výrobu biopalív druhej generácie a chemikálií je k dispzícii široká škála termických a katalytických reaktorov. Zatiaľ nie sú špecifikované najvýhodnejšie. Reaktory s fluidným lôžkom sú robustné s bohatou škálou veľkosti reaktorov, ale majú problémy s prestupom tepla pri veľkokapacitných systémoch. Mechanické zariadenia, akými sú ablatívne, rotačné kužeľovité a šrubovnicové reaktory, majú výhody v kompaktnosti, neprítomnosti fluidizačného plynu, ale trpia na veľkostný problém a takmer vždy na problémy spojené s pohyblivými časťami, najmä pri vysokých teplotách.

Táto práca vznikla za podpory GA SR VEGA 1/0228/12

PP8
NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

David Lukáš[1], Pavel Pokorný[1], Petr Mikeš[1], Jiří Chvojka[1], Eva Košťáková[1], Lucie Vysloužilová[1], Julie Soukupová[1], Jana Bajáková[1], Filip Sanetrník[1], Jiří Chaloupek[1], Karel Pejchar[1]

[1]*Technická univerzita v Liberci, Studentská 2, 461 17, Liberec 1-Staré město, david.lukas@tul.cz*

Od Cooleyho objevu elektrostatického zvlákňování letos uplyne 114 let [1]. Tato technologie v současné době umožnuje

uspokojivě reprodukovatelnou i výkonou výrobu vláken s průměry pod jeden mikron.

Přednáška pojednává o vývoji nových variant elektrostatického zvlákňování. Jmenovitě se jedná o výrobu nanovláken typu jádro plášť metodou bezjehlového zvlákňování a o produkci nanovláken účinkem elektrického pole bez přítomnosti protielektrody, tzv. kolekteru. Dále referujeme o snaze o výrobu nanovlákenných přízí nebo multifilů.

Obr. 1 Varianta elektrostatického zvlákňování bez použití protielektrody. Snímek zachcuje dýmu podobný oblak nanovláken z PVB vyprodukovaný zvlákňovací elektrodou umístěnou v dolní části obrázku.

Autoři příspěvku děkuji za podporu grantu GAČR č. P208/12/0105.

[1] Cooley, J. F. Improved methods of and apparatus for electrically separating the relatively volatile liquid component from the component of relatively fixed substances of composite fluids. United Kingdom Patent 6385. 1900.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 1: ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1P01
NMR SPECTROSCOPY OF SLOVAK TOKAJ WINE

L. Husáriková, K. M. Kaliňák, M. Mazúr

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK - 812 37 Bratislava, Slovak Republic; e-mail: milan.mazur@stuba.sk

The object of presented contribution is to study the characteristic properties of Slovak Tokaj wines based on ^{1}H NMR spectroscopy. The smallest of the six vineyard regions of Slovakia is the Tokaj vineyard region. This region include in seven villages - Bara, Čerhov, Černochov, Malá Tŕňa, Slovenské Nové Mesto, Veľká Tŕňa and Viničky, in the Trebišov district. The climatic, geographic and soil conditions of the Tokaj region are unique. These facts enable the winemaker to grow top quality grapes. *Furmint, Lipovina* and *Muškát žltý* are three grape varieties, which form the basis of Tokaj wine production. A special feature of this region is the creation of so called „cibébs", grape raisins, which are affected by the mold culture *Botrytis cinerea*. The exceptionality of Tokaj wines is caused by the special processing technology so called „oxidative method", the unique form of storage in „tuff cellars" and by their long-term aging. In conclusion, ^{1}H NMR spectroscopy can be used for monitoring of organic and amino acids found in Tokaj wine samples. The ^{1}H NMR resonance signals of minor compounds detected in Tokaj wines can be used as their original „*fingerprints*" for monitoring of Slovak wines.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract Nos. (APVV-0202-10 and APVV-0339-10), Slovak State Program Project No. 2003SP200280203 (NMR measurements) and Scientific Grant Agency of the Slovak Republic (Projects VEGA 1/0856/11, 1/0289/12).

1P02
VÝHODY A ÚSKALÍ JEDNOTLIVÝCH KOKRYSTALIZAČNÍCH TECHNIK

Veronika Sládková[1], Bohumil Kratochvíl[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, Praha 6-Dejvice, 16628, Česká republika sladkovv@vscht.cz*

Výběr vhodné pevné formy farmaceutické substance (API) je ovlivněn jak z hlediska jejích technologických a užitných vlastností, tak i z hlediska ochrany duševního vlastnictví. Rozšíření výběru o kokrystaly může nabídnout celou škálu nových forem s výhodnými vlastnostmi. Po polymorfním screeningu a screeningu solí se proto kokrystalizační screening stal neodmyslitelnou součástí vývoje pevné formy API.

Vhodnou kokrystalizační metodou či kombinací více technik lze zajistit spolehlivý screening, z kterého můžeme získat maximum nových pevných forem API.

Starší kokrystalizační metody za použití rozpouštědla jsou v současné době nahrazovány metodami bez rozpouštědel. Zredukování počtu experimentů ale nutně nevede k nalezení všech dostupných forem a proto se často využívá kombinace obou způsobů. V této studii jsme se zabývali srovnáním různých kokrystalizačních technik, zda nové metody jako jsou kokrystalizace v suspenzi či kokrystalizace podporovaná ultrazvukem (sonokokrystalizace) mohou nahradit krystalizaci pomalým odpařováním. Zároveň jsme zhodnotili možné přednosti a nedostatky velice specifických metod (kokrystalizace fluidním sušením).

Tato práce vznikla s podporou MŠMT 604 613 7302 a MŠMT 20/2013.

1P03
POTENTIOSTATIC DEPOSITION OF DNA – A TECHNIQUE FOR THE DEVELOPMENT OF HIGH-THROUGHPUT METHODS FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE

Vlastimil Vyskočil, Marta Blašková, Zuzana Hrochová, Zuzana Jurečková, Klára Stávková, and Andrea Hájková

Charles University in Prague, Faculty of Science, University Research Centre UNCE "Supramolecular Chemistry", Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Hlavova 2030/8, 128 43 Prague 2, Czech Republic, vlastimil.vyskocil@natur.cuni.cz

In recent years, a growing interest has arisen in the development of simple, rapid, and user-friendly methods for centralized screening of genotoxic organic compounds. Electrochemical DNA biosensors, realized by immobilizing an oligonucleotide sequence on a suitable electrode surface, are simple to assemble and can provide reliable results [1]. When carbon-based transducers are used for the preparation of a biosensor, a DNA stock solution is most frequently dropped onto a bare electrode and left to evaporate to dryness for several hours (usually overnight) in order to obtain a DNA layer stable during subsequent use of the biosensor in solution [2]. This limitative step in the preparation of the biosensor can be successfully replaced using a potentiostatic deposition of DNA.

In this contribution, electrochemical (voltammetric and impedimetric) DNA biosensors utilizing low molecular weight double-stranded DNA as a biorecognition layer potentiostatically immobilized onto two different carbon-based transducers (a glassy carbon electrode and a microcrystalline natural graphite–polystyrene composite film electrode [3]) will be introduced as new tools for the high-throughput detection of DNA damage caused by various organic xenobiotic compounds. The whole preparation of these biosensors takes no more than five minutes, which represents a significant shortening of the preparation time in comparison to procedures making use of an air-drying a DNA solution on an electrode surface [1-3].

This research was carried out in the framework of the Specific University Research (SVV 2013). Financial support from the Grant Agency of the Czech Republic (Project GP13-23337P) is gratefully acknowledged.

[1] Lenka Hlavatá, Katarína Beníková, Vlastimil Vyskočil, Ján Labuda: Electrochim. Acta, 71, 134-139 (2012).
[2] Vlastimil Vyskočil, Ján Labuda, Jiří Barek: Anal. Bioanal. Chem., 397, 233-241 (2010).
[3] Vlastimil Vyskočil, Jiří Barek: Procedia Chem., 6, 52-59 (2012).

1P04
SPECTROSCOPIC STUDY OF CAMPTOTHECIN DERIVATIVE SN-38

Miroslava Bobeničová, Dana Dvoranová

Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic, miroslava.bobenicova@stuba.sk

Camptothecin and its derivatives are one of the most important anticancer drugs. Camptothecin itself shows a low solubility in water and adverse drug reactions, while irinotecan, its derivative, is a water soluble pro-drug, converted by decarboxylation to an active and more cytotoxic metabolite SN-38. Despite its promising anticancer potential, SN-38 has not been used as an anticancer drug due to its poor solubility in any pharmaceutical solvent. Additionally, SN-38 is more potent than CPT-11 as a Topoisomerase I inhibitor [1]. The camptotecin molecules also behave as photosensitizers, so we paid attention in last years on photoinduced processes of these molecules [2,3]. The experiments with camptothecin and irinotecan were carried out, while derivative SN-38 has been studied now. Our study is focused on ability of SN-38 to generate paramagnetic intermediates upon monochromatic irradiation (λ = 365 nm) using the UV/Vis spectroscopy and EPR spin trapping technique in aerobic and anaerobic atmosphere. We confirmed that the irradiation led to the generation of oxygen- and carbon-centered radicals and their formation was depended on the reaction system and conditions.

This work was financially supported by Scientific Grant Agency (VEGA Project 1/0289/12) and Research and Development Agency of Slovak Republic under the contract No. APVV-0339-10.

[1] Vanderbeeken, M.-C., Aftimos, P.G., Awada, A. Curr. Breast Cancer Rep. 5 (2013) 31.
[2] Brezová, V., Valko, et all. J. Phys. Chem. B 107 (2003) 2415.
[3] Dvoranová, D., Brezová, V. , Valko, M., Staško, A. J. Photochem. Photobiol. A: Chem. 185 (2007) 172.

1P05
VYUŽITÍ A CHARAKTERIZACE SAMOEMULGUJÍCÍCH SYSTÉMU S LÉČIVY

Lenka Seilerová[1], Bohumil Kratochvíl[1], Veronika Sieberová[1], Hana Brusová[2]

[1]Ústav chemie pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, lenka.seilerova@vscht.cz
[2]Zentiva k.s., U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10

Až 60% nově vyvíjených aktivních substancí patří mezi špatně rozpustná léčiva, proto se také stále rozšiřuje spektrum metod pro zlepšení jejich rozpustnosti. Mezi taková léčiva patří i candesartan cilexetil, který v této práci využíváme jako modelovou špatně rozpustnou léčivou látku. Pro zlepšení rozpustnosti candesartanu cilexetilu jsme s ním připravili tzv. samoemulgující systémy (z anglického: Self-emulsifying drug delivery systems, SEDDS). Tyto systémy jsou definovány jako směsi přírodních nebo syntetických olejů, surfaktantů a kosurfaktantů, které tvoří s aktivní substancí mikroemulzi, jejichž vznik zatím není zcela popsaný. Proto bylo naším cílem nejen zlepšit rozpustnost vybraného léčiva, ale i charakterizovat proces emulgace. K tomuto popisu byl využit vysce citlivý mikrokalorimetr micro-DSC III.

V této práci jsme pozorovali vliv složení emulze na léčivo. Emulze byly vytvořeny různými kombinacemi oleje Miglyolu, surfaktantů Capryol 90, Cremophor EL a kosurfaktantů Transcutolu nebo Polyethylenglykolu (PEG 400). Dále jsme charakterizovali tepelnou stabilitu jednotlivých směsí ve vodě a dále kinetiku emulsifikace vzorků samoemulgujících systémů. Nezbytnou součástí této práce bylo také ověření zlepšení rozpustnosti candesartanu cilextilu. Jeho rychlost uvolňování jsme porovnali i s uvolňováním z komerčně dostupného léčivého přípravku s odlišnou formulací. Rozpustnost candesartanu cilexetilu byla několikanásobně zvýšena přípravou samomulgujících systémů. Směsi jsou tepelně stabilní a jako nejefektivnější byla vyhodnocena směs s obsahem PEG 400 a Cremophoru.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT (Rozhodnutí č. 20/ 2013) a projektu MŠMT č. 604 613 7302.

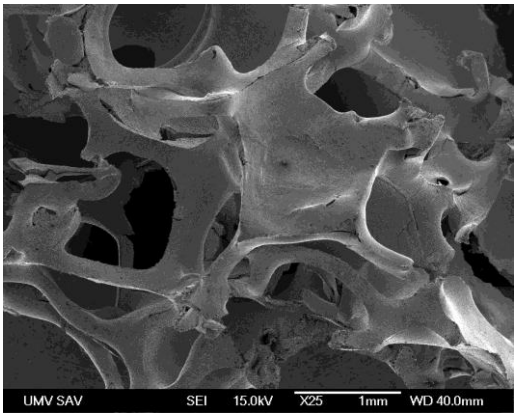
1P06
ŠTÚDIUM DEGRADÁCIE BIOLOGICKY ODBÚRATEĽNÝCH KOVOVÝCH MATERIÁOV

Renáta Oriňáková[1], Andrej Oriňák[1], Miriam Kupková[2], Monika Hrubovčáková[2], Andrea Fedorková[1], Andrea Morovská Turoňová[1]

[1]Katedra fyzikálnej chémie PF UPJŠ, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Renata.Orinakova@upjs.sk
[2]Ústav materiálového výskumu SAV, Watsonova 47, 040 01 Košice

Biologicky odbúrateľné kovové materiály, ktoré je organizmus schopný rozložiť, absorbovať a vylúčiť fyziologickou cestou, predstavujú pomerne novú triedu biomateriálov [1]. V súčasnosti sa v klinickej praxi používajú implantáty, ktoré v tele pacienta ostávajú natrvalo alebo také, ktoré je neskôr potrebné operačne odstrániť [2]. Nové druhy implantátov, ktorých základom sú biologicky rozložiteľné kovy, ako sú horčík a železo, sa môžu prispôsobiť ľudskému telu, v ktorom sú implantované a keď už nie sú potrebné, rozpustia sa. Biodegradovateľné systémy ponúkajú oproti implantátom používaným v dnešnej dobe veľké výhody v špecifických aplikáciách, ako napríklad v kardiochirurgii a ortopedickej chirurgii.

V tejto práci boli študované materiály s otvorenou štruktúrou na báze železa pre potenciálne ortopedické aplikácie. Celulárne materiály boli pripravené impregnáciou polyuretánovej peny Fe práškom a následným spekaním. Biologická odbúrateľnosť pripravených materiálov bola študovaná metódou anodickej oxidácie ako aj statickými ponorovými skúškami pri teplote 37°C v rôznych simulovaných telesných tekutinách. Bola pozorovaná rovnomerná korózia pripravených materiálov na celom povrchu. In vitro testy toxicity a biokompatibity potvrdili vhodnosť pripravených celulárnych materiálov pre potenciálne využitie ako bilogicky odbúrateľných implantátov.



Obr. 1 SEM snímka biologicky odbúrateľného celulárneho Fe materiálu pripraveného práškovými technológiami.

Príspevok vznikol s podporou Agentúry na podporu výskumu a vývoja (projekt APVV-0677-11) a vedeckej grantovej agentúry MŠ SR VEGA (1/0211/12 a 2/0168/12).

[1] H. Hermawan et al.: Developments in metallic biodegradable stents, Acta Biomaterialia 6 (2010) 1693 – 1697.

[2] B. Wegener et al.: Microstructure, cytotoxicity and corrosion of powder - metallurgical iron alloys for biodegradable bone replacement materials, Materials Science and Engineering B 176 (2011) 1789 – 1796.

1P07
SEPARACE AMERICIA Z KONCENTRÁTU KYSELINY BORITÉ Z ODPARKY PRIMÁRNÍHO OKRUHU JADERNÉ ELEKTRÁRNY DUKOVANY

Pavel Bartl, Jana Šuľaková, Jan John, Ferdinand Šebesta

Katedra jaderné chemie, ČVUT v Praze – FJFI, Břehová 7, 115 19 Praha 1, pavelbartl80@gmail.com

Práce se zabývá vypracováním metody pro separaci americia ze vzorků koncentrátu z odparky primárního okruhu jaderné elektrárny Dukovany obsahujících kyselinu boritou, jako prvního kroku při jeho stanovení, pomocí pevného extrahentu TODGA-PAN obsahujícího tetraoktyldiglykolamid (TODGA) zakotvený na inertním nosiči modifikovaného polyakrylonitrilu (PAN).

Zkoumány byly závislosti váhových distribučních koeficientů americia na koncentraci kyseliny borité, na pH s rozpětím hodnot 1,5 - 5, na koncentraci koncentrátu a na koncentraci dalších iontů významně zastoupených v provozním koncentrátu jako jsou nitráty, oxaláty, citráty, uhličitany, a některé kationty, které interferují při separaci americia z těchto typů vzorků. Pro eluci americia byla studována možnost využití roztoku kyseliny šťavelové, která umožnila přímé použití minimálně upravovaného eluátu pro přípravu vzorků pro stanovení americia alfa-spektrometrií metodou elektrodepozice ze síran-šťavelanového elektrolytu [1].

V závěrečné fázi bylo studováno chování plutonia, jakožto možného kontaminantu z řady aktinoidů, který by mohl interferovat při integrálním měření záření alfa, v tomto extrakčně-chromatografickém systému.

[1] LEE, M. H.; KIM, Ch. J.; BOO, B. H. Electrodeposition of Alpha-Emmiting Nuclides from Ammonium Oxalate-Ammonium Sulfate Electrolyte. Bull. Korean Chem. Soc., Vol. 21, No. 2 (2000).

1P08
COPPER COMPLEXES WITH CYPROCONAZOLE SEPARATED USING ION MOBILITY

Jana Jaklová Dytrtová[1], Michal Jakl[2]

[1] Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Prague 6, Czech Republic; dytrtova@uochb.cas.cz
[2] Department of Agro-Environmental Chemistry and Plant Nutrition, Faculty of Agrobiology, Food and Natural Resources, Czech University of Life Sciences Prague, Kamýcká 129, 165 21 Prague – Suchdol, Czech Republic

Copper complexes with the pesticide cyproconazole (Cyp; Figure 1) have been studied using ion mobility Synapt G2 (Waters, UK) with electrospray ionization Q-ToF mass spectrometer. In positive mode the complexes are created both with Cu(I) and Cu(II). The Cu(II) complexes include: (i) singly charged complexes with chloride anion, such as $[Cu(Cyp)_2Cl]^+$, (ii) singly charged complexes with deprotonated Cyp (Cyp-H), as $[Cu(Cyp)(Cyp\text{-}H)]^+$, or with Cyp residues, such as $[Cu(Cyp)(Cyp\text{-}C_5H_9)]^+$, and (iii) doubly charged complexes, as $[Cu(Cyp)_2]^{2+}$. Cu(I) creates only one complex with two molecules of Cyp $[Cu(Cyp)_2]^+$. The presence of Cu(I) can be explained by the reduction of Cu(II) to Cu(I) during the electrospray [1].

Collision induced dissociation experiments [2] reveal the stability of Cu(I) complex $[Cu(Cyp)_2]^+$ with *m/z* 645 (lightest isotope) is 10-times higher than its Cu(II) analogue $[Cu(Cyp)(Cyp\text{-}H)]^+$ with *m/z* 644 (lightest isotope). The *m/z* ratios of the

complexes differ in one H^+, it causes problems with direct isotope patterns interperation. The isotopes were interpreted using the fitting procedure in Xcalibur 2.1 (Thermo Scientific) programme. Two complexes were separated after MS/MS isolation of the whole mixed pattern in ion mobility. However, the signal belonging to the $[Cu(Cyp)(Cyp-H)]^+$ complex was low because its decay during the collision with separation gas.

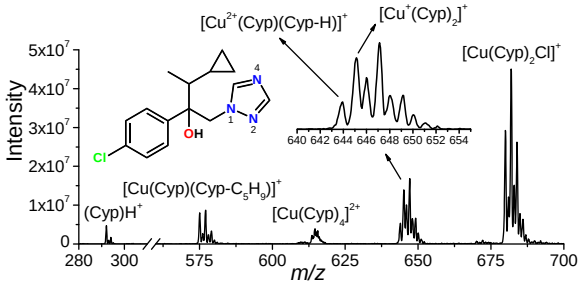


Figure 1. Positive mode ESI mass spectrum in the range from *m/z* 280 to 700 of an equimolar mixture of Cyproconazole (Cyp) and $CuCl_2$ (both $5 \cdot 10^{-5}$ mol L^{-1}) methanol/water (1:1). The mixed isotope pattern $[Cu^{2+}(Cyp)(Cyp-H)]^+$ and $[Cu^+(Cyp)_2]^+$ is shown in an expanded mass scale.

This work was supported by the GACR project No. 13-21409P and the MSMT S grant.

[1] J. Jaklová Dytrtová et al., Rapid Commun. Mass Spectrom. 2011, *25*, 1037.
[2] E.L. Zins, et al., J. Mass Spectrom. 2010, *45*, 1253.

1P09
LÍTIUM-SÍRA-$LiFePO_4$ NANOKOMPOZITNÝ KATÓDOVÝ MATERIÁL PRE Li/S BATÉRIE

Andrea Fedorková[1,2], Renáta Oriňáková[1], Marie Sedlaříková[2], Pedro Gómez-Romero[3]

[1]*Institute of Chemistry, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Moyzesova 11, SK-040 01 Košice, Slovak Republic,* andrea.fedorkova@upjs.sk
[2]*Department of Electrical and Electronic Technology, Faculty of Electrical Engineering and Communication, 616 00 Brno University of Technology, Czech Republic*
[3]*Centro de Investigación en Nanociencia y Nanotecnología, CIN2 (CSIC-ICN), Campus UAB, E-08193 Bellaterra, Barcelona, Spain*

Elementárna síra je považovaná za jeden z najsľubnejších kandidátov ako materiál pre kladnú elektródu vysoko výkonných lítiových batérií. Jej teoretická špecifická kapacita je 1672 mAh/g, pri reakcii s lítiom za vzniku Li_2S čo je až desať násobne viac v porovnaní s dnešnými katódovými materiálmi. Cyklovateľnosť týchto batérií je však nízka kvôli vytváraniu polysulfidov počas nabíjania a vybíjania. Tie zahusťujú kvapalný elektrolyt, upchávajú separátor a spôsobujú nevratnú stratu aktívnej hmoty – síry. Preto je nutné síru uzavrieť, alebo enkapsulovať do vodivého materiálu, ktorý udrží polysulfidy vo svojom vnútri. Zároveň musí byť dostatočne porézny a flexibilný, aby sa vedel prispôsobiť objemovým zmenám, ku ktorých dochádza počas reakcie síry a lítia. Vhodným riešením je spojenie konverzného typu materiálu – síry a interkalačného materiálu $LiFePO_4$, ktoré sa spoja uhlíkom, alebo mnohostennými nanotrubičkami. Tie zvýšia vodivosť a zároveň dokážu absorbovať do svojich pórov nerozpustné polysulfidy. Touto kombináciou dokážeme zvýšiť cyklovateľnosť a zároveň zachovať vysokú kapacitu (~ 1000 mAh/g) výsledného kompozitného materiálu.

Tento príspevok vznikol s podporou projektu VEGA 1/0211/12 a projektu CZ.1.07/2.3.00/30.0039.

1P10
SOUVISLOST MEZI MIKROPORÉZNÍMI CHARAKTERISTIKAMI UHLÍKATÝCH ADSORBENTŮ A JEJICH SCHOPNOSTÍ ADSORBOVAT Pb(II) Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Tomáš Zelenka, Jana Štefelová

Ostravská univerzita v Ostravě, přírodovědecká fakulta, katedra chemie, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, tomas.zelenka@osu.cz

Cílem tohoto příspěvku je posoudit vliv mikroporézních charakteristik uhlíkatých adsorbentů zjištěných adsorpcí CO_2 vzhledem k jejich schopnosti vázat olovnaté ionty z vodných roztoků.

Vybrané přírodní i uměle syntetizované adsorbenty (uhlí, uhlíkaté kryogely) byly podrobeny volumetrické adsorpční analýze pomocí CO_2 s využitím analytického přístroje PCTPro E&E (Setaram) pro charakterizaci jejich mikroporézního systému. Ze získaných adsorpčních izoterem studovaných adsorbentů byl získán objem mikropórů (v rozsahu 0,06 – 0,3 cm^3 g^{-1}) pomocí Dubinin-Radushkevichovy rovnice. Povrch mikropórů (160 – 820 m^2 g^{-1}) byl vypočten z Medkovy rovnice. Na identických uhlíkatých adsorbentech byly experimentálně provedeny sorpce olovnatých iontů z vodných roztoků. Maximální adsorpční kapacita byla vyhodnocena z Langmuirovy izotermy.

Tento příspěvek je podpořen z projektu „Institut environmentálních technologií“, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100. Dále je podpořen projektem SGS č. SGS02/PřF/2013.

1P11
FOTOINDUKOVANÁ SYNTÉZA HEXAGONÁLNÍHO OXIDU ZINEČNATÉHO

Lenka Procházková, Václav Čuba

Katedra jaderné chemie, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze, Břehová 7, 11519 Praha 1

V poslední době jsou studovány různé metody přípravy hexagonálního wurtzitického oxidu zinečnatého, jako je epitaxiální růst, sol-gel či hydrotermální metody. Fotochemická metoda, založená na fotoindukovaném vysrážení pevné fáze z ozářeného roztoku, umožňuje připravit nanokrystalické oxidy o vysoké čistotě, úzké distribuci velikosti částic a výborné krystalinitě[1].

Roztoky obsahující vhodné prekurzory byly ozařovány po dobu 100 min fotony o vlnové délce 253,7 nm, emitovanými nízkotlakou Hg-výbojkou. Vysrážená pevná fáze byla separována mikrofiltrací a charakterizována pomocí XRPD (X-ray powder diffraction).

Ozářením vodného roztoku dusičnanu zinečnatého a mravenčanu draselného došlo k vysrážení krystalického uhličitanu zinečnatého. Jestliže byl ozářen vodný roztok mravenčanu zinečnatého s přídavkem peroxidu vodíku, pevná fáze se vysrážela v podobě peroxidu zinečnatého. Tepelným opracováním těchto krystalických prekurzorů při teplotách v rozmezí 200-1100 °C byl získán hexagonální ZnO o velikosti částic 30-80 nm. Velikost krystalitů rostla s teplotou opracování.

Ozáření roztoku dusičnanu zinečnatého a propan-2-olu vedlo k fotochemickému vysrážení dobře krystalického hexagonálního ZnO o velikosti částic 20-30 nm již za pokojové teploty, bez dalšího tepelného opracování.

Touto fotoindukovanou syntézou byly vedle nanokrystalického ZnO úspěšně připraveny také nanokompozity $Zn_{1-x}Cd_xO$ a $Zn_{1-x}Mg_xO$ o různém zastoupení Zn:Cd a Zn:Mg v pevné fázi. Materiály po tepelném opracování vykazují výbornou krystalinitu.

Tato práce vznikla za podpory grantu Studentské grantové soutěže ČVUT č. SGS11/163/OHK4/3T/14 a Grantové agentury ČR projekt 13-09876S.

[1] Gbur T., Čuba V., Múčka V., Nikl M., Knížek K., Pospíšil M., Jakubec I., Photochemical preparation of ZnO nanoparticles, J Nanopart Res *13*, 4529-4537 (2011)

1P12
ZABEZPEČENÍ KVALITY VÝSLEDKŮ VE VÝZKUMNÉ LABORATOŘI

David Milde[1]

[1]*Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, david.milde@upol.cz*

Převážná část komerčních laboratoří přijala v předchozích létech některý ze systémů managmentu kvality (ISO/IEC 17025 či ISO 9000+). Tyto systémy kladou velký důraz na zabezpečení kvality výsledků a laboratoře jsou v pravidelných intervalech kontrolovány, zda stále splňují požadavky těchto norem. Péče o kvalitu výsledků ve výzkumných laboratořích není vyžadována legislativou a je pouze na zákazníkovi výzkumu či na redakční radě časopisu, do kterého jsou výsledky výzkumu posílány, jako úroveň zabezpečení kvality výsledků vyžaduje.

Příspěvek představí současné možnosti, jak zabezpečovat kvalitů výsledků v laboratořích, které k tomu nejsou vedeny systémem z mezinárodních dokumentů a norem. Budou prezentována současná doporučení odborných společnosti [1] jakož i praktické zkušenosti autora z práce v laboratoři stopové prvkové analýzy. Zmíněny budou otázky týkající se metrologické návaznosti, validace postupů, nejistoty měření, základní způsoby interní kontroly kvality ve výzkumné laboratoři a také používání a možnosti přípravy referenčních materiálů [2].

Autor děkuje MŠMT ČR za finanční podporu v rámci projektu INGO LG 11010.

[1] C. Adams a kolektiv: Quality Assurance for Research and Development and Non-routine Analysis. EURACHEM/CITAC Guide. LGC, Teddington (1998). Dostupné z www.eurachem.org

[2] B. Brookman, R. Walker: Guidelines for the in-house production of Reference Materials. VAM LGC, Teddington (1998). Dostupné z www.nmschembio.org.uk

1P13
ZNAČENÍ DNA ELEKTROAKTIVNÍMI SKUPINAMI PRO BIOANALYTICKÉ APLIKACE

Miroslav Fojta[1], Medard Plucnara[1], Pavlína Vidláková[1], Jan Špaček[1], Aleš Daňhel[1], Petr Orság[1], Petra Horáková[1], Hana Pivoňková[1], Jana Balintová[2], Petra Ménová[2], Veronika Raindlová[2], Hana Macíčková-Cahová[2], Jan Riedl[2], Luděk Havran[1], Michal Hocek[2]

[1]*Biofyzikální ústav AVČR, v.v.i., Královopolská 135, 612 65 Brno, Česká republika; fojta @ibp.cz*
[2]*Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i., Flemingovo náměstí 2, 166 10 Praha 6, Česká republika*

Elektrochemická analýza se osvědčila jako jeden z účinných nástrojů studia struktury a interakcí nukleových kyselin [1]. Vzhledem k tomu, že nukleové kyseliny jsou díky přítomnosti redukovatelných a/nebo oxidovatelných bazí samy o sobě elektrochemicky aktivní a navíc vykazují specifické adsorpčně-desorpční chování na elektricky nabitých površích, není nutno je pro některé typy analýz značit (např. detekce poškození DNA pomocí voltametrie na rtuťových a amalgamových elektrodách). Naproti tomu v případě analýzy nukleotidových sekvencí technikami hybridizace DNA, detekce mutací a sekvenčních polymorfismů se spíše osvědčují metody využívající modifikaci DNA elektrochemicky (redox-) aktivními skupinami, které poskytují voltametrické signály při jiných potenciálech než přirozené nukleobáze. Pomocí nich je možno „kódovat" určité úseky DNA o známé sekvenci (hybridizační sondy) nebo přímo jednotlivé nukleobáze. Tyto značky lze do DNA zavést různými metodami. Osvědčila se kovalentní modifikace thyminových zbytků v DNA pomocí komplexů oxidu osmičelého [2]. Jinou možností je zavést do DNA modifikované nukleotidy pomocí enzymů (DNA polymeráz nebo terminálních transferáz). Tento přístup vyžaduje deoxynukleotid trifosfáty (dNTP) nesoucí příslušné modifikace [3]. Připravili jsme dNTP značené řadou elektroaktivních skupin, včetně organokovů (ferocen), komplexů kovů (Os, Ru), aromatických nitroderivátů a dalších elektroaktivních organických látek (antrachinon, benzofurazan, hydrazinové deriváty a další). V příspěvku budou prezentovány jejich elektrochemické vlastnosti a bioanalytické aplikace.

Práce vznikla za podpory Grantové agentury České republiky (P206/12/G151)

[1] E. Paleček and M. Bartošík, *Chem Rev*, 2012, **112**, 3427-3481.
[2] M. Fojta, P. Kostecka, H. Pivonkova, P. Horakova and L. Havran, *Curr Anal Chem*, 2011, **7**, 35-50.
[3] M. Hocek and M. Fojta, *Chem Soc Rev*, 2011, **40**, 5802-5814.

1P14
NOVÉ METODY ELEKTROFORETICKÉHO STANOVENÍ NEUROTRANSMITERŮ

Petr Tůma[1], Klára Málková[1]

[1]*Ústav biochemie, molekulární a buněčné biologie, 3. lékařská fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, petr.tuma@lf3.cuni.cz*

Velmi rychlé stanovení adrenalinu, noradrenalinu a dopaminu bylo provedeno v kapiláře vytvořené spojením 25 μm analytické kapiláry a 100 μm pomocné kapiláry [1]. Pomocí spojení dvou kapilár o různých vnitřních průměrech se podařilo dosáhnout intenzity elektrického pole v analytické kapiláře rovné 2,7 kV/cm. Za těchto podmínek trvá úplná separace tří neurotransmiterů 13,3 s s hodnotami separační účinnosti 2350 až 2760 pater/s.

V druhé studii byla vyvinuta nová varianta large volume sample stacking pro stanovení kyseliny γ-aminomáselné, glycinu a glutamátu v mikrodialyzátech centrální nervové soustavy [2, 3]. Kapilára je naplněna vzorkem mikrodialyzátu s přídavkem acetonitrilu až do 98% z celkové délky kapiláry. Po zapnutí separačního napětí dochází k zaostření vzorku a zóna acetonitrilu je vytlačena z kapiláry. Za těchto podmínek se limity detekce pohybují v rozmezí 9 až 15 nM při použití univerzální bezkontaktní vodivostní detekce. Vyvinutá metodika byla úspěšně použita při monitorování hladin neurotransmiterů v mozku potkanů s indukovanou hyperalgesií a po následném podání paracetamolu.

Autoři děkují Grantové agentuře Univerzity Karlovy, grant GAUK 389111, a Grantové agentuře České Republiky, grant GAČR P206/11/0707, za finanční podporu.

[1] [Tůma, P., Opekar, F., Samcová, E., *Electrophoresis* 2013, *34*, 552-556.
[2] Tůma, P., Šustková-Fišerová, M., Opekar, F., Pavlíček, V., Málková, K., *J. Chromatogr. A* 2013, 1-7, in press.
[3] Tůma, P., Soukupová, M., Samcová, E., Štulík, K., *Electrophoresis* 2009, *30*, 3436-3441.

1P15
OPTIMALIZACE MINERALIZAČNÍ METODY BIOLOGICKÝCH VZORKŮ S OBSAHEM NANOČÁSTIC STŘÍBRA BEZ POUŽITÍ MIKROVLNNÉHO MINERALIZÁTORU

Šárka Hradilová[1], Aleš Panáček[2], Robert Prucek[2], Libor Kvítek[2], Radek Zbořil[2]

[1] Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, Olomouc 783 71, sarka.hradilova@upol.cz
[2] Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc 779 00

Nanotechnologie a nanomateriály zásadním způsobem ovlivňují mnoho oborů lidské činnosti. Setkáváme se s nimi v medicíně, potravinářství, automobilovém průmyslu a celé řadě dalších odvětví. Vyšší kontakt s nanočásticemi přináší ale i otázky ohledně bezpečnosti nanočástic pro živé organismy, především z pohledu dlouhodobé expozice. Množí se proto experimenty na zvířatech, které se zabývají studiem mechanismu účinku a biodistribucí nanočástic v jejich vnitřních orgánech. Typickým příkladem jsou nanočástice stříbra, které nachází uplatnění především v medicínských aplikacích či v kosmetice díky svým baktericidním vlastnostem. Současně jsou nanočástice stříbra předmětem intenzívního výzkumu z pohledu jejich toxických vlastností. V případě metod *in vivo* je zkoumána nejen samotná toxicita nanočástic stříbra, ale také jejich biodistribuce a akumulace v tělních orgánech pokusných zvířat. Ve většině případů jsou biologické vzorky před analýzou pomocí AAS či ICP standardně mineralizovány v prostředí směsi HNO_3 a H_2O_2 v mikrovlnném mineralizátoru. Nicméně naše experimenty prokázaly, že tato metoda v mnoha případech nevede ani k 70% výtěžnosti stříbra při známe vstupní koncentraci tohoto kovu. Změnou obsahu a poměru jednotlivých složek mineralizační směsi a úpravou mineralizačního procesu se podařilo značně zvýšit výtěžnost až na 92% a to navíc bez nutnosti použít mikrovlnný mineralizátor, který je poměrně nákladným zařízením a ne každé pracoviště jím disponuje.

Tato práce byla podpořena projekty Operační program Výzkum a vývoj pro inovaci reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, GAČR GAP304/10/1316 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2013_031.

1P16
ELEKTROSEPARÁCIE NA MIKROČIPOCH A ICH APLIKAČNÝ POTENCIÁL V ENVIRO- A BIOANALÝZE

Marián Masár[1], Peter Troška[1], Ladislav Danč[1], Jasna Hradski[1], Drahoslava Kabátová[1], Katarína Uhlárová[1], Marína Rudášová[1], Róbert Bodor[1]

Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, masar@fns.uniba.sk

Koncepcia miniaturizovaných analytických systémov (MAS) sa presadzuje v analytickej inštrumentácii pozoruhodným tempom. MAS sa postupne uplatňujú v oblasti separačných techník, analýzy proteínov a DNA, imunoanalýzy, monitorovania životného prostredia, chemickej syntézy a procesnej analýzy. Všeobecnou črtou MAS je integrácia úpravy vzorky, separácie a detekcie analytov, čo umožňuje dosiahnuť vysokú mieru automatizovateľnosti analytického postupu, znížiť celkový čas analýzy a významne zredukovať finančné nároky, ako aj produkciu (toxického) odpadu.

Jednou z najrýchlejšie sa rozvíjajúcich separačných metód v oblasti MAS je mikročipová elektroforéza (MCE). Analytické využitie MCE v praxi je však limitované z hľadiska dostupnosti vhodných miniaturizovaných prostriedkov na úpravu vzoriek a nových technológií pre miniaturizáciu detekčných systémov. V tomto kontexte technológia spájania separačných kanálikov (CC) môže byť považovaná za veľmi efektívny prostriedok na integráciu úpravy vzorky s MCE separáciou a detekciou analytov v zmysle koncepcie MAS.

Cieľom tohto príspevku je diskutovať niektoré metodologické aspekty a ukázať aplikačné možnosti MCE využívajúcej CC techniku s preferovanou on-line integrovanou vodivostnou detekciou v analýze komplexných environmentálnych biologických vzoriek. Diskutované budú rôzne spôsoby integrácie úpravy vzoriek pred finálnou MCE separáciou a detekciou s cieľom zjednodušenia matrice a odstránenia potenciálnych interferujúcich látok priamo na mikročipe, resp. off-line využitie miniaturizovaných spôsobov úpravy vzoriek. Praktické využitie MCE bude ukázané na stanovení stopových koncentrácií analytov vo veľmi komplexných environmentálnych a biologických matriciach.

Táto práca bola finančne podporená Vedeckou grantovou agentúrou MŠ SR (VEGA 1/1149/12) a vytvorená realizáciou projektu „Priemyselný výskum

nových liečiv na báze rekombinantných proteínov (ITMS: 26240220034)" na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

1P17
POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PRO STANOVENÍ KONCENTRACE L-CYSTEINU A JEHO ENANTIOMERICKÉ ČISTOTY

Pavel Řezanka[1], Jakub Koktan[1], Hana Řezanková[2], Pavel Matějka[3], Vladimír Král[1]

[1] Vysoká škola chemicko-technologická, Ústav analytické chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika, Pavel.Rezanka@vscht.cz
[2] Katedra statistiky a pravděpodobnosti, Vysoká škola ekonomiká, Praha, Náměstí W. Churchilla 4, 130 67 Praha 3, Česká Republika
[3] Vysoká škola Chemicko-technologická, Ústav fyzikální chemie, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká Republika,

Systém obsahující nanočástice stříbra (~45 nm) [1] a L-cystein v rozsahu koncentrací od 10^{-9} do 10^{-2} mol/L byl studován absorpční a cirkulární dichroickou spektroskopií v UV-Vis oblasti a povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií při různém pH a iontové síle. Díky velkému zesílení nanočástic byl povrchem zesílenou Ramanovou spektroskopií detekován cystein již při koncentraci 10^{-9} mol/L. Analýzou spekter cirkulárního dichroismu statistickými metodami [2], jmenovitě dvoukrokovou klastrovou analýzou, metodou hlavních komponent a regresí metodou nejmenších čtverců, bylo možné stanovit koncentraci L-cysteinu v rozsahu 10^{-5} až 10^{-3} mol/L. Dále bylo zjištěno, že studovaný systém je velmi citlivý na přítomnost D-cysteinu, a proto je možné stanovit enantiomerní poměr už v přítomnosti D-cysteinu o koncentraci 10^{-6} mol/L, tj. při obsahu 2% tohoto enantiomeru ve směsi.

Tato práce byla podpořena grantem P206/12/P026 Grantové agentury České Republiky

[1] Řezanka, P.; Záruba, K.; Král, V. *Colloid. Surf. A* **2011**, *374*, 77-83.
[2] Řezanka, P.; Řezanková, H.; Matějka, P.; Král, V. *Colloid. Surf. A* **2010**, *364*, 94-98.

1P18
VÝVOJ A POUŽÍTÍ HPLC/MS METODY STANOVENÍ IBUPROFENU

Marek Mucha[1], Jiří Kalina[1], Adam Pukowiec[1]

[1]Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta OU, 30.dubna 22, 701 03 Ostrava, marek.mucha@centrum.cz

Ibuprofen, jenž je aktivní látkou léčiv užívaných například při léčbě bolestí (zad, hlavy či zubů) nebo při revmatických obtížích, se díky nedokonalostem v metabolismu a v čistírnách odpadních vod může dostávat do životního prostředí [1,2]. Tato práce se zabývá vývojem metody stanovení ibuprofenu a jejím použitím při výzkumu možností odstranění ibuprofenu takzvanou „sáčkovou metodou".

První částí práce byl vývoj a otestování metody na HPLC/MS systému Ultimate 3000/micrOTOF-QII (dodavatel Bruker, s.r.o., ČR) s kolonou Gemini 5µ C18 110A (Phenomenex, USA). Za pomocí acetonitrilu, methanolu a vody (Merck KGaA, Německo), jež sloužily k přípravě mobilní fáze, byla vyvinuta metoda s limitem kvantifikace 1 ng/l, korelačním koeficientem linearity větším než 0,99 a odchylkami v opakovatelnosti, reprodukovatelnosti, přesnosti a správnosti menšími než 11%.

Druhou částí práce byl výzkum možností odstranění ibuprofenu z vod za pomocí adsorpce na sorbety umístěné v sáčcích (aktivní uhlí, RFA, RFB, celulózový xerogel a drcené listy křídlatky) a možností regenerace sorbentů za pomocí desorpce methanolem. Nejvyšších hodnot pro adsorpci (účinnost 99,4%) a desorpci (účinnost 1,2%) bylo dosaženo pro aktivní uhlí. Vzhledem k těmto výsledkům byl proveden další desorpční test zaměřený na různě kombinace rozpouštědel, kdy nejvyšší desorpční účinnosti (60%) bylo dosaženo pro kombinaci voda:acetonitril v poměru 60:40.

Tato práce byla vypracována v rámci grantu SGS identifikační číslo sgs03/PřF/2013 a projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR.

[1] LÜLLMANN, Heinz, Klaus MOHR a Martin WEHLING. *Farmakologie a toxikologie: překlad 15., zcela přepracovaného vydání*. Vyd. 2. české. Praha: Grada, 2004, 725 s. ISBN 80-247-0836-1.
[2] VAŠÍČKOVÁ, P. *Stanovení reziduí léčiv pomocí separačních metod*. Diplomová práce. Brno: Vysoké učení technické v Brně, 2010. 79 s.

1P19
HODNOTENIE AKTIVITY NANOROZMERNÝCH KATALYZÁTOROV PYROLÝZNOU PLYNOVOU CHROMATOGRAFIOU

Andrej Oriňák[1], Renáta Oriňáková[1] , Branislav Erdelyi[1]

[1]Univerzita P.J.Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra fyzikálnej chémie, Moyzesova 11, 04154 Košice, andrej.orinak@upjs.sk

Pyrolýzna plynová chromatografia predstavuje unikátnu metódu pre analýzu organickej tuhej vzorky bez predúpravy. Na injektorovú časť plynového chromatografu sa aplikuje pyrolýzny nástavec, on-line prepojený na chromatografickú kolónu, kde prebieha separácia analytov pyrolyzátu. Zmenou teploty pyrolýzy sa ovplyvňuje zloženie pyrolyzátu a získava sa „odtlačok prsta“ vzorky v teplotnej závislosti. Uvedená metóda bola aplikovaná pre hodnotenie aktivity nanotrubičkových katalyzátorov s Cu a Zn v procese konverzie metánu na vodík. Študované boli teplotné závislosti katalyzovanej pyrolýznej konverzie aj na type nanorozmerného katalyzátora. Výsledky boli porovnávané s klasickými katalyzátormi na báze aktívneho uhlia a nanoštruktúrovaného striebra. Pre jednotlivé typy katalyzátorov boli vypočítané stupne konverzie a kinetická konštanta. Z výsledkov vyplýva, že doposiaľ pripravené nanorozmerné katalyzátory na báze nanotrubičiek prekračujú aktivitu doteraz používaných uhlíkových katalyzátorov. Aktivita katalyzátora bola sledovaná metódou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónom (SIMS) a klesá približne po 110 cykloch konverzie. Regenerácia katalyzátora je jednoduchá - vodnou parou. Keďže plynná fáza pyrolyzátu po degradácii odpadných plastov obsahuje vodík, metán, ľahké uhľovodíky ako aj oxidy uhlíka, do budúcnosti sa uvažuje s prípravou takých nanorozmerných katalyzátorov, ktoré by umožňovali využiť optimálne zloženie pyrolyzátu pre konverziu na metanol, cennú surovinu mnohých technologických procesov.

Autori ďakujú za poskytnuté grantové prostriedky agentúre VEGA 1/0211/12 a APVV-0677-11.

1P20
STANOVENIE ZINKU V ODPADOCH Z GUMÁRENSKÉHO PRIEMYSLU ELEKTROCHEMICKOU ROZPÚŠŤACOU ANALÝZOU NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM

Eva Culková[1], Peter Tomčík[1], Jaroslav Durdiak[1], Ľubomír Švorc[2], Miroslav Rievaj[2], Dušan Bustin[2], Ján Lokaj[3,4]

[1] Katedra chémie, Pedagogická fakulta, Katolícka univerzita v Ružomberku, Hrabovská cesta 1, 034 01 Ružomberok, peter.tomcik@ku.sk
[2] Oddelenie analytickej chémie, Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lubomir.svorc@stuba.sk
[3] Oddelenie keramiky, skla a cementu, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava
[4] Katedra materiálového inžinierstva, Materiálovotechnologická fakulta, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Paulínska 16, 917 24 Trnava, jan.lokaj@stuba.sk

Zinok je významný ťažký kov vo vyšších koncentráciách toxický. Jeho spotreba rastie aj z rozvojom gumárenského priemyslu, pretože zlúčeniny zinku sa pridávajú do vulkanizačnej zmesi ako akcelerátory vulkanizácie. Z odpadov pneumatík sa zinok môže dostať do životného prostredia a stať sa súčasťou potravinového reťazca. Preto je dôležité monitorovať koncentrácie zinku v environmentálnych, biologických a potravinárskych vzorkách.

V tomto prispevku je prezentovaná nová elektrochemická metóda pre stanovenie zinku v gumárenských odpadoch a odpadových vodách. Metóda demonštruje veľmi priaznivé analytické vlastnosti diamantu dopovaného bórom ako materiálu indikačnej elektródy, na ktorú možno deponovať zinok pri potenciáli -1,7 V vs. Ag/AgCl. Štúdie založené na optickej mikroskopii a AFM nasvedčujú, že proces depozície zinku je podobný ako pri ostatných ťažkých kovoch, založený na procese nukleácie a raste nukleačných centier charakteru nanočastíc až zrn deponovaného kovu. Optimalizáciou experimentálnych podmienok sa získal detekčný limit 4.7×10^{-10} mol l^{-1}, veľmi dobrá opakovateľnosť snímania rozpúšťacích voltampérogramov (RSD 3,2%) a pomerne široký lineárny dynamický koncentračný rozsah v romedzí 5×10^{-10} to 5×10^{-6} mol l^{-1} pre 0.1 mol l^{-1}

KCl ako základný elektrolyt a čas depozície 120s. Analýzu neruší ani 100 násobný prebytok ostatných ťažkých kovov ako Hg^{2+}, Cu^{2+}, Pb^{2+} a Cd^{2+}, pretože ich dobre vyvinuté signály sú dobre potenciálovo separované. Navyše za prítomnosti ortuti sa nepozoruje tvorba píkov intermetalických zlúčenín. Zistené skutočnosti potvrdzujú, že elektróda z diamantu dopovaného bórom je environmentalne akceptovateľný, citlivý a selektívny senzor na monitorovanie ťažkých kovov vo vzorkách zo životného prostredia [1].

Práca bola finančne podporená Slovenskou vedeckou grantovou agentúrou VEGA (projekty 1/0008/12, 1/0051/13 a 1/2594/12) a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja APVV (projekt 0797-11)

[1] Eva Culková, Ľubomír Švorc, Peter Tomčík, Jaroslav Durdiak, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin, Roman Brescher, Ján Lokaj: Boron-doped diamond electrode as very sensitive and selective green electroanalytical tool for heavy metals environmental monitoring: Detection of zinc in waste from rubber industry., Zaslané do Polish Journal of Environmental Studies (2013).

1P21
ELEKTRICKÉ, TEPELNÉ A DYNAMICKO MECHANICKÉ VLASTNOSTI POLYMÉRNYCH KOMPOZITOV NA BÁZE LDPE A EXPANDOVANÉHO GRAFITU

Ján Kratochvíla[1], Zdenko Špitálský[1], Daniela Jochec Mošková[1], Radhouan Tlili[2], Abderrahim Boudenne[2], Igor Krupa[1,3]

[1] Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84541 Bratislava, Slovakia, jan.kratochvila@savba.sk
[2] Centre d'Etude et de Recherche en Thermique, Environnement et Systèmes, Université Paris-Est, 61 Av. du Général de Gaulle, 94010 Créteil Cedex, France
[3] Center for Advanced Materials, Qatar University, P.O. Box 2713, Doha, Qatar

Výskumu vodivých polymérnych kompozitov sa dlhodobo venuje značný záujem nielen vo vedeckej ale aj v priemyselnej sfére. Jedným z najperspektívnejších plnív je expandovaný grafit, ktorý v ideálnom prípade môže byť v matrici exfoliovaný vo forme grafénových nanočastíc. Polymérne mikro a nano kompozity pripravené z expandovaného grafitu s vysokým aspektívnym pomerom dosahujú výrazné zlepšenie mechanických, tepelných, elektrických či bariérových vlastností [1].

Sledované kompozity boli pripravené z nízkohustotného polyetylénu (LDPE), ktorý slúžil ako matrica. Ako plnivo sme použili elektricky vodivý expandovaný grafit s rôznou veľkosťou častíc 5, 50 a 500µm. Najvyšia hodnota elektrickej vodivosti bola zistená pre zmes LDPE/GFG500 pri koncentrácii plniva 38 obj.%. Perkolačný prah sa nachádza v rozmedzí 4,3-6,7 obj.%.

Tepelne vodivé polymérne kompozity ponúkajú možnosť výmeny kovových častí vo výmeníkoch tepla
v systémoch uchovávania tepelnej energie, za ľahšie a korózii odolnejšie polymérne kompozitné materiály [2]. Zmes LDPE/GFG500 dosiahla hodnotu tepelnej vodivosti 6.50 $W.m^{-1}.K^{-1}$ pri koncentrácii 38 obj.%.

Štúdiom dynamicko mechanických vlastností sme sledovali stužujúci účinok plniva, ktorý závisí od koncentrácie plniva v matrici. Pri meraniach dynamicko mechanických vlastností v šmyku sme pozorovali závislosť komplexnej viskozity a frekvencie. Pri meraniach v ohybe sme sledovali dynamický a stratový modul vzoriek.

Poďakovanie: Výskum bol podporovaný vedeckým grantom Agentúry Ministerstva Školstva Slovenskej Republiky, Slovenskou Akadémiou Vied – Vega projekt 2/0119/12 a projektom Slovenskej Akadémie Vied ERA-Net APGHRAPHEL.

[1] Krupa.I.; Prokeš.J.; Křivka.I.; Špitálský.Z.; Electrically Conductive Polymeric Composites and Nanocomosites; 2011; Handbook of multiphase polymer system 425-472
[2] Kratochvíla J., Boudenne A., Krupa I.,: Polymer Composites, 2013, vol. 34, iss. 2, p. 149 - 155.

1P22
MERANIE ELEKTRICKEJ VODIVOSTI A XPS ŠTÚDIUM STARNUTIA POLYPYROLU

Jana Tabačiarová[1], Matej Mičušík[1], Pavol Fedorko[2], Mária Omastová[1]

[1] Ústav Polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, jana.tabaciarova@savba.sk, http://www.polymer.sav.sk/
[2] Oddelenie chemickej fyziky, Fakulta Chemickej a Potravinárskej Technológie, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

Vodivé polyméry patria v súčasnosti k najštudovanejším materiálom vďaka ich širokému spektru uplatnenia ako súčasť batérií, elektrochromických zariadení alebo senzorov. K najvýznamnejším vodivým polymérom patrí polypyrol, ktorý sa dá ľahko pripraviť chemickou oxidačnou polymerizáciou, vyznačuje sa najmä

dobrou chemickou a termooxidačnou stabilitou s vodivosťou okolo 10 S/cm.

Z pohľadu využitia je dôležitým parametrom jeho životnosť a s tým spojená stabilita, ktorá sa sleduje meraním jeho elektrickej vodivosti v čase. Spôsob prípravy a typ oxidačného činidla ovplyvňuje ako morfológiu, tak i vlastnosti pripraveného polypyrolu [1, 2].

Naše štúdium je zamerané na prípravu polypyrolu chemickou oxidačnou polymerizáciou použitím štyroch rôznych oxidačných činidiel, $FeCl_3$, $FeCl_3.6H_2O$, $Fe_2(SO_4)_3$, $(NH_4)_2S_2O_8$. Pre porovnanie sa pripravila vzorka použitím kombinácie $FeCl_3$ a aniónového tenzidu, dodecylbenzénsulfónovej kyseliny (DBSA) ako kodopantu. Štruktúrne zmeny počas 20 mesačného štúdia starnutia polypyrolu boli študované pomocou röntgenovej fotoelektrónovej spektroskopie (XPS), doplnená objemovou analýzou FTIR a elementárnou analýzou. Miera včlenenia aniónu, resp. kodopantu do π-konjugovanej štruktúry polypyrolu bola sledovaná pomerom anión/N^+. Pokles elektrickej vodivosti, ako ukazovateľa chemickej stability starnuceho polypyrolu možno priradiť postupnej oxidácii materiálu, ktorá sa prejaví nárastom obsahu kyslíka na povrchu a zmenám chemických stavov polymérneho reťazca.

Najstabilnejším typom zo študovaných vzoriek je polypyrol pripravený v prítomnosti DBSA, ktorý si udržal najlepšiu vodivosť a pozorovaných bolo najmenej štruktúrnych zmien.

Táto práca vznikla za podpory projektov VEGA 2/0064/10, VEGA 1/1072/11 a projektu COST MP 1003.

[1] Omastová M., Trchová M., Kovářová J., Stejskal J.: Synth. Metals. 138, 447 (2003).
[2] Boukerma K., Mravčáková M., Omastová M., Mičušík M., Vaulay M.-J., Beaunier P., Chehimi M. M.: Colloid Surfaces A, 293, 28 (2007).

1P23
KINETIKA RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE NEIONIZOVANEJ KYSELINY AKRYLOVEJ VO VODNEJ FÁZE

Marek Stach[1], Anna Chovancová[1], Igor Lacík[1]

[1]*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, marek.stach@savba.sk*

Kinetikou radikálovej polymerizácie vo vodnej fáze sa zaoberáme posledných desať rokov. Základným cieľom bolo získavať rýchlostné konštanty propagácie, k_p, pre radikálovú polymerizáciu vodorozpustných monomérov vo vodnej fáze. Na určovanie k_p hodnôt sa použila technika pulznej laserovej polymerizácie v kombinácii s gélovou permeačnou chromatografiou (PLP−SEC), ktorá je odporúčaná organizáciou IUPAC. Touto technikou sme stanovili k_p hodnoty pre kyselinu (met-)akrylovú, (met-)akrylamidy, *N*-vinyl amidy a zwitteriónny.

V tejto práci uvádzame k_p hodnoty pre neionizovanú kyselinu akrylovú polymerizovanú vo vodnej fáze. Doteraz dostupné k_p hodnoty boli určené použitím 100 Hz pulzného lasera pre teplotný interval od 2 do 28,5 °C a rozsah koncentrácií monoméru od 1 do 40 hm.% [1,2]. Strata PLP štruktúry distribúcie mólových hmotností pri vyšších teplotách je spôsobená prenosovými reakciami, ktoré sa pozorujú pre kyselinu akrylovú polymerizovanú vo vodnej fáze, ako aj pre iné akrylátové monoméry. Za účelom rozšírenia teplotného intervalu, pre ktorý sú k_p hodnoty dostupné, boli polymerizácie uskutočnené použitím 500 Hz pulzného lasera, tak ako to bolo urobené v prípade iných monomérov akrylátového typu [3].

Pomocou PLP−SEC metódy a použitím 500 Hz pulzného lasera boli určené k_p hodnoty pre teploty až do 60 °C a koncentrácie monoméru do 60 hm.%. Tieto hodnoty súhlasia s hodnotami, ktoré boli určené v predchádzajúcej práci [2].

Táto práca bola finančne podporená BASF SE, Ludwigshafen, Agentúrou na podporu výskumu a vývoja s číslom projektu APVV-0486-10 a Grantovou agentúrou VEGA s číslom projektu 2/0160/12.

[1] I. Lacík, S. Beuermann, M. Buback, Macromolecules 2001, 34, 6224–6228
[2] I. Lacík, S. Beuermann, M. Buback, Macromolecules 2003, 36, 9355–9363
[3] C. Barner-Kowollik, F. Gunzler, T. Junkers, Macromolecules 2008, 41, 8971–8973

1P24
STUDIUM VLIVU KONCENTRACE CHLORIDOVÝCH IONTŮ NA INTENZITU POVRCHOVÉHO ZESÍLENÍ RAMANOVA SIGNÁLU ZA POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA

Ariana Fargašová, Robert Prucek, Václav Ranc, Aleš Panáček, Libor Kvítek, Radek Zbořil

Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, PřF UP, Šlechtitelů 11, 78371, Olomouc, ariana.fargasova@upol.cz

Nanočástice stříbra (AgNPs) se staly běžnou součástí mnoha komerčních výrobků díky jejich optickým, elektronickým či antibakteriálním vlastnostem. Mimo jiné se uplatňují jako substrát v povrchem zesílené Ramanově spektroskopii (SERS), kde hraje důležitou roli jejich velikost a morfologie. Jako nejběžnější substráty pro SERS jsou využívány AgNPs připravené redukcí borohydridem sodným [1] nebo citrátem sodným [2], které však díky hůře opakovatelnému postupu přípravy často poskytují nereprodukovatelné SERS výsledky.

AgNPs samy o sobě neposkytují výrazné zesílení Ramanova signálu, a proto musejí být dále „aktivovány“ přídavkem anorganických iontů, nejčastěji chloridových. Nejběžněji jsou využívány koncentrace Cl^- v rozsahu od 0,1 mM do 20 mM [3], kde takto nízké množství vyvolá pomalou agregaci AgNPs a nástup zesílení Ramanova signálu je tak velmi zdlouhavý.

Uvedená práce se zabývá studiem vlivu širokého rozsahu koncentrací chloridových iontů na SERS účinnost AgNPs, připravených redukcí amoniakálního komplexu stříbrných iontů D-maltosou, o průměrné velikosti 28 nm. Takto připravené AgNPs jsou stabilní po dobu více než dvou let. Na základě měření průměrné velikosti částic byl prokázán, v závislosti na koncentraci Cl^-, strmý nárůst průměrné velikosti částic stříbra dosahujících velikostí až 400 nm po 15 minutách od přídavku chloridových iontů. Tyto částice poskytují zesílení Ramanova signálu pro různé excitační vlnové délky ve viditelné oblasti spektra.

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, GAČR GAP304/10/1316, OPVK 2.3 (CZ.1.07/2.3.00/20.0056), vnitřního grantu UP Olomouc (PřF_2013_031) a TAČR TA03011368.

[1] J. Alan Greighton, Christopher G. Blatchford, M. Grant Albrecht: Journal of the Chemical Society. Faraday Transactions II, 75, 790-798, (1979)
[2] P. C. Lee, D. Meisel: J. Phys. Chem., 86, 3391-3395 (1982)
[3] Nicolae Leopold, Bernhard Lendl: J. Phys. Chem. B, 107, 5723-5727 (2003)

1P25
(SPEKTRO) ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM NOVÉHO ENERGETICKÉHO MATERIÁLU FOX-7

Ludmila Šimková[1], Jiří Klíma[1], Jiří Ludvík[1]

[1]*Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Dolejškova 3, 182 23 Praha, Česká republika, ludmila.simkova@jh-inst.cas.cz*

Nová necitlivá výbušnina s vysokým výkonem FOX-7 (2,2-dinitroethen-1,1-diamin) [1] je široce zkoumána především pro její možné použití. Na druhou stranu základní výzkum na molekulární úrovni je ojedinělý a jakýkoli elektrochemický výzkum k této molekule chybí. Vedle možného použití je tato molekula zajímavá také svou strukturou. FOX-7 představuje uspořádáním elektrondonor a elektronakceptorových skupin typický příklad push-pull ethylenu. Tento typ stabilizace umožňuje přenos elektronů v molekule. Korelace UV-vis, IR a NMR analýzy prokázala výskyt molekuly FOX-7 ve třech různých strukturách v nevodném prostředí a acidobazické rovnováhy ve vodném prostředí.

Ukázalo se, že redukce za polarografických (analytických) a elektrolytických (preparativních) podmínek ve vodném pufrovaném prostředí se liší [2]. Při polarografii dochází k heterogenní redukci na elektrodě v časové škále max. 2 sec. se spotřebou 18 elektronů. Oproti tomu při preparativní elektrolýze je spotřeba elektronů na molekulu výchozí látky výrazně nižší, pouze 4–7 elektronů, z důvodu probíhajících pomalejších homogenních následných reakcí meziproduktů.

V nevodném prostředí je FOX-7 redukován pouze 2 elektrony až do –2,9 V [3]. Počet redukčních kroků je ovlivněn odlišnou strukturou výchozí látky. Malý počet spotřebovaných elektronů ukazuje na složitý mechanismus reakce zahrnující radikálové meziprodukty a kombinaci elektrodových a chemických kroků. Postup elektrochemické redukce byl proto doprovázen in situ spektroelektrochemickým měřením.

Tato práce vznikla s podporou grantu P206/11/0727 (GAČR). Poděkování patří Ing. Zdeňku Jalovému

z Ústavu energetických materiálů FCHT University Pardubice za syntézu zkoumané látky.

[1] N. V. Latypov, J. Bergman, *Tetrahedron*, 54, (1998).
[2] L. Šimková, J. Klíma, P. Sazama, J. Ludvík, *J. Solid State Electrochemistry*, 15, (2011).
[3] L. Šimková, J. Urban, J. Klíma, J. Ludvík, *I.R.E.CH.E.*, 4, (2012).

1P26
KVANTIFIKACE VLIVU ROZPOUŠTĚDLA NA KINETIKU HYDROGENACE NITRILŮ

Kamila Procházková[1], Jiří Krupka[1], Nikola Ruhswurmová[1]

[1] Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, jiri.krupka@vscht.cz

Práce se zabývala studiem vlivu rozpouštědla na kinetiku hydrogenace nitrilů. I přes značné využití heterogenně katalyzované hydrogenace nitrilů v chemickém a farmaceutickém průmyslu není doposud v literatuře žádná ucelená studie, která by se zabývala kvantifikací vlivu reakčního média na selektivitu a reakční rychlost zmíněné reakce.

Byla sledována selektivita a reakční rychlost hydrogenace modelového substrátu - isobutyronitrilu na niklovém katalyzátoru ve 24 různých rozpouštědlech. Bylo zjištěno, že rychlost hydrogenace je dramaticky ovlivněna použitým rozpouštědlem, a že významné rozdíly v reakčních rychlostech nejsou způsobeny jen rozdílnou rozpustností vodíku v reakčních směsích, ale jsou dány i jinými fyzikálně-chemickými vlastnostmi rozpouštědla.

Byl učiněn pokus o nalezení korelace mezi jednotlivými fyzikálně-chemickými charakte–ristikami rozpouštědel a reakční rychlostí a selektivitou hydrogenace. Za tímto účelem byla experimentální data zpracovávána empirickou metodou multiparametrické lineární regrese odvozené na základě principu lineárních solvatačních energií s použitím modelu Abrahama-Kamleta-Tafta (AKT). Cílem práce bylo zjistit, jak která vlastnost rozpouštědla ovlivňuje kinetiku hydrogenace nitrilů, zejména selektivitu tvorby primárního, případně sekundárního a terciárního aminu.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č.20/2013 (IGA VŠCHT: A2_FCHT_2013_013).

1P27
STANOVENIE KONCENTRÁCIE INDIA ROZPÚŠŤACOU CHRONO–POTENCIOMETRIOU

Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František, Labuda Ján

Ústav analytickej chémie, Fakulta Chemickej a potravinárskej technológie,
STU Bratislava, Radlinskeho 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, e-mail: alena.manova@stuba.sk

Na technologický progres sa v dnešnej dobe upriamuje celý svet. Vývoj nasleduje míľovými krokmi avšak následky tohto extrémneho rastu sa neskúmajú. Novodobé technológie okrem iného jednoznačne zahrňujú používanie dotykových a LCD displejov, ktoré obsahujú indium.

Ďalším z kozmopolitných záujmov je odstra–ňovanie odpadov vzhľadom k životnému prostrediu. Pretože nie je vedecky dokázaný dopad india a jeho zlúčenín na životné prostredie, bolo by potrebné sa týmto problémom zaoberať.

Práve pre tento fakt, je veľmi dôležité vytvárať stále novšie a efektívnejšie metódy a zariadenia, pomocou ktorých budeme stanovovať obsahy india priamo v potenciálnych zdrojoch znečistenia.

Poďakovanie: Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APW-0797-11
a za podpory Vedeckej grantovej agentúry VEGA, projekt č. 1/0182/11.

1P28
FOTOAKTIVNÍ NANOVLÁKENNÉ MATERIÁLY

Mosinger Jiří[1,2], Henke Petr[1], Kubát Pavel[3]

[1]Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika
[2]Ústav anorganické chemie, vvi, AVČR, 250 68 Řež, Česká republika
[3]Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, vvi, AVČR, Dolejškova 3, 182 23 Praha 8, Česká republika

Fotoaktivní nanovlákenné materiály tvořené polymerními nanovlákny (průměr vláken 150-250 nm) s enkapsulovanými či externě vázanými porfyrinoidními sensitizery jsou efektivními producenty singletového kyslíku ($^1O_2$) během ozařování viditelným světlem. Materiály byly charakterizovány pomocí UV-VIS, fluorescenční a časově rozlišené spektroskopie. Analyzovány byly doby života singletových a tripletových stavů sensitizerů a fotogenerovaného $^1O_2$ [1-5].

Tripletové stavy fotosensitizerů v/na nanovlákenné vrstvě jsou účinně zhášeny kyslíkem. V případě enkapsulovaných sensitizerů je nutnou podmínkou dostatečná difúze $^3O_2$ polymerem. Zhášení tripletových stavů kyslíkem lze využít k výpočtu kyslíkové permeability a difúze [2]. Doby života $^1O_2$ jsou okolím nanovláken silně ovlivněny, to vypovídá o schopnosti $^1O_2$ difundovat do okolí nanovláken i v případě enkapsulovaných sensitizerů. Zdokumentována byla rovněž tzv. zpožděná fluorescence sensitizeru, kdy dochází k repopulaci singletových stavů fotosensitizeru interakcí jeho tripletových stavů s $^1O_2$. Zpožděnou fluoresceni lze využít k detekci O_2 [3].

Schopnost nanovlákenných materiálů s enkapsulovanými i externě vázanými sensitizery fotogenerovat $^1O_2$ byla potvrzena fotooxidací řady anorganických a organických substrátů. Baktericidní a virucidní efekt sensitizerem dopovaných nanovlákenných materiálů byl prokázán na bakteriích *Escherichia coli, Staphylococcus aureus* a *Pseudomonas aeruginosa* a neobalených polyomavirech a obalených bakulovirech a ukázal desinfikující účinky na površích nanovlákenných materiálů ozařovaných viditelným světlem. [1,2,4,5].

[1] Mosinger J., Jirsák O., Kubát P., Lang K., Mosinger B. Jr. (2007) Bactericidal Nanofabrics Based on Photosensitized Formation of Singlet Oxygen. J Mater Chem 17: 164 –166.

[2] Jesenská S.; Plíštil L.; Kubát P.;Lang K.;Popelka S.; Szatmary L.; Mosinger J. **(**2011) Antibacterial Nanofiber Materials Activated by light. J. Biomed. Mater. Res. Part A 99A: 676-683.

[3] Mosinger J .; Lang, K.; Plíštil, L.; Jesenská, S.; Hostomský, J.; Zelinger, Z.; Kubát, P.(2010) Fluorescence Polyurethane Nanofabrics: A Source of Singlet Oxygen and Oxygen Sensing. Langmuir 26: 10050-10056.

[4] Lhotáková, Y.; Plíštil, L.; Morávková, A.; Kubát, P.; Lang, K.; Forstová, J.; Mosinger. (2012) Virucidal Nanofiber Textiles Based on Photosensitized Production of Singlet Oxygen. Plos One e49226.

[5] Henke, P.; Lang, K.; Kubát, P.; Sýkora J., Šlouf M., Mosinger, J. (2013) Polystyrene Nanofiber Materials Modified with an Externally Bound Porphyrin Photosensitizer. ACS Appl Mater Interfaces 5: 3776-3783.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 2: ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2P01
NOVÉ MOŽNOSTI ELEKTROLYTICKEJ PRÍPRAVY ŽELEZANOV Z TAVENÍN

Ján Híveš, Miroslav Gál, Marta Ambrová, Kamil Kerekeš

Slovenská technická univerzita v Bratislave- FCHPT, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jan.hives@stuba.sk

Železany, látky v ktorých je atóm železa v oxidačnom stupni 6+, sú známe už dve storočia no napriek tomu ich najintenzívnejší výskum sa realizoval za posledných 20 rokov [1]. Dôvodom sú ich silné oxidačné vlastnosti, ktoré môžu byť využité predovšetkým pri ochrane vody a tiež z dezinfekčného a detoxikačného hľadiska. Železany sú vysoko účinné oxidanty schopné rozložiť nebezpečné znečisťujúce látky (chemické aj biologické) vo vodnom prostredí. Ich výhodou je rýchla reakcia, netoxický produkt $Fe(OH)_3$ správajúci sa ako účinný sorbent a koagulant a vo väčšine prípadov zabezpečuje kompletný rozklad znečisťujúcej látky bez nebezpečných vedľajších produktov. Naviac, hydratovaný Fe_2O_3 je bežnou súčasťou prírody a teda neznečisťuje životné prostredie. Možnosti prípravy železanov je niekoľko, najperspektívnejšou sa javí elektrochemická príprava. Hlavným cieľom tejto práce je podať ucelený obraz o elektrochemickej príprave železanov, zhrnúť poznatky o početných faktoroch vplývajúcich na účinnosť elektrochemickej prípravy železanov, vypichnúť možnosti ďalšej optimalizácie procesu prípravy železanov. Na elektrochemickú prípravu železanu v tavenine sa testovali rôzne systémy hydroxidov a ich zmesí [2]. Značný pokrok sa udial v chápaní teoretickej aj praktickej stránky elektrochemickej prípravy železanov. Významný pokrok sa dosiahol v poznaní úlohy povrchovej vrstvy anódy pri vzniku železanov a vplyv zloženia anódy a anolytu na túto vrstvu.

Na charkterizáciu procesov prebiehajúcich na stacionárnej pracovnej elektróde vyrobenej z čistého železa, železa s prímesou Si a bielej liatiny sa použili elektrochemické metódy ako cyklická voltametria (CV) a elektrochemická impedančná spetroskopia (EIS). Anódové prúdové píky zodpovedajúce tvorbe železanu ako

aj katódové prúdové píky zodpovedajúce jeho redukcii sú zrejmé z polarizačných kriviek. Metóda EIS sa použila pri charakterizácii povrchových vrstiev anódového materiálu pri príprave železanov. Impedančné spektrá sú charakteristické dvoma časovými konštantami, ktoré sa môžu interpretovať pomocou modelu dvojitej povrchovej vrstvy na anóde [3].

Túto prácu finančne podporili: Ministerstvo školstva, vedy, výskumu a športu SR grantom VEGA 1/0985/12 a ERDF projektom ITMS 26240220073.

[1] Z. Mácová, K. Bouzek, J. Híveš, V.K. Sharma, R.J. Terryn, and J.C. Baum, Electrochem. Acta, 54 (2009) 2673-2683.
[2] L. Hrnčiariková, J. Híveš, K. Kerekeš, J. Kamenár, M. Gál, Acta Chimica Slovaca, 3 (2010) 74-83.
[3] L. Hrnčiariková, K. Kerekeš, J. Híveš, M. Gál, Int. J. Electrochem. Sci., 8 (2013) 7768–7778.

2P02
FLUORESCENT CARBON DOTS

Ondřej Kozák, Kateřina Holá, Kumara Kasibhatta Ramanatha Datta, Radek Zbořil

Regional Centre of Advanced Technologies and Materials, Faculty of Science, Department of Physical Chemistry, Palacky University in Olomouc, 77146, Czech Republic

Carbon-based nanoparticles known as carbon dots (CDs) represent a new family of low-dimensional materials in line with other carbon nanostructures like graphene, fulerenes or carbon nanotubes. Similarly to other quantum dots, CDs exhibit unique optical properties, namely photoluminescence (PL). These properties make them utilizable in a variety of applications like biological imaging, sensing, optoelectronics, photocatalysis etc. [1]. However, in contrast to the widely used semiconductors such as CdSe, CDs posses indisputable advantages of low toxicity, excellent optical and chemical stability, cost-effective preparation or easy functionalization and thus leave behind the traditional semiconductors in a range of aspects.

Still, a number of challenges wait to be accepted. Among them, tuning the PL wavelength, enhancing the PL quantum yield, development of alternative and promising synthetic and post-production processes, controlling the surface chemistry and understanding the PL mechanism is in the scope of our research group. Herein, we approach to these tasks by employing different precursors, carbonization methods and post-preparative techniques to obtain CDs with diverse properties which make them special in several ways.

[1] Li, H.; Kang, Z.; Liu, Y.; Lee, S. J. Mater. Chem., 2012, 22, 24230

2P03
MIKROBIÁLNE OVPLYVNENÁ KORÓZIA ZINKOVÝCH POVLAKOV

Matilda Zemanová[1], Jana Vávrová[1], Ľudmila Krištofíková[1], Jana Kozánková[1]

[1]Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, matilda.zemanova@stuba.sk

Vláknitá huba *Aspergillus niger* sa použila na demonštrovanie mikrobiálne ovplyvnenej korózie na povlaku zinku vylúčenom elektrochemicky. Morfológia povrchu a korózne produkty sa určili použitím elektrónovej mikroskopie. Korózne správanie pripravených materiálov vystavených rôznym aeróbnym médiám sa monitorovalo elektrochemicky, optickou mikroskopiou a zaznamenaním zmeny hmotnosti v jednotlivých časových intervaloch.

Chemoheterotrofné mikroorganizmy, ako použitý kmeň *A. niger*, nie sú schopné množiť sa a metabolizovať bez uhlíka ako zdroja energie. Keďže v použitých roztokoch nebola prítomná žiadna organická látka, spóry sa nachádzali v latentnom (pokojovom) stave a neboli schopné produkovať extracelulárne metabolity, takže ani ióny kovov nevstupovali do ich metabolizmu. Z tohto dôvodu je urýchlenie korózie v dôsledku lúhovania kovu extracelulárnymi metabolitmi vylúčené. Môžu však byť sorbované na ich povrchu v pevnej fáze [1-3]. Pracovalo sa s roztokmi tzv. štandardov (fyziologický a nutričný) bez mikroorganizmov a s nutričným roztokom obsahujúcim rôzne koncentrácie spór huby *A. niger*, pričom sa analyzovalo ich pôsobenie na povlak zinku.

Vo fyziologickom roztoku sa zaznamenala bodová korózia v dôsledku prítomnosti chloridových iónov. Zistilo sa, že spóry kmeňa *Aspergillus niger* inhibovali korózne procesy na zinkovom povlaku. Inhibícia korózie je za skúmaných podmienok spôsobená tvorbou biofilmu a kryštálov na povrchu vzorky za obmedzenia priameho kontaktu vzorky s roztokom a tým zabráneniu korózii.

Poďakovanie za finančnú podporu počas realizácie projektu grantom APVV-038-10 a VEGA 1/0588/11.

[1] Dercová, K., Makovníková, J., Barančíková, G., Žuffa, J.: Chem Listy 99 (2005) 682
[2] Juzeliunas, E., Ramanauskas, R., Lugauskas, A., Samulevičiene, M., Leinartas, K.: Electrochemistry Communications 7 (2005) 305
[3] San, N.O., Nazir, H., Donmez, G.: Corrosion Science 64 (2012) 198

2P04
EXPERIMENTÁLNÍ A TEORETICKÉ STUDIUM ROVNOVÁHY SYSTÉMU Zn-Co-O

Michal Kamrádek[1], Jindřich Leitner[1]

[1]*Ústav inženýrství pevných látek VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha, Michal.Kamradek@vscht.cz*

Zředěné magnetické polovodiče DMS (*dilute magnetic semiconductors*) jsou významnou skupinou materiálů, u kterých se předpokládá jejich využití ve spintronice. Mezi tyto materiály, které v sobě spojují vlastnosti polovodičů a feromagnetických látek patří také oxid zinečnatý dotovaný přechodnými kovy (Co, Ni, Fe, obecně TM – *transition metal*), který je díky vysoké Curieově teplotě zajímavý také z hlediska praktického využití. Jedním z faktorů, které ovlivňují výsledné vlastnosti DMS je obsah dotující příměsi v materiálu. Při vysokém obsahu dotujícího kovu v polovodiči může docházet ke vzniku paramagnetických fází a ke ztrátě požadovaných vlastností. V případě dotování ZnO(wz) ve wurtzitové struktuře uvedenými přechodnými kovy je obsah příměsi limitován rozpustností TM resp. TMO_x v ZnO a vznikem pevného roztoku (Zn,TM)O(wz). Při překročení maximální rozpustnosti dochází k tvorbě sekundárních fází – pevného roztoku (Zn,TM)O(rs) v halitové struktuře nebo spinelu $ZnTM_2O_4$. V řadě prací [1,2] bylo prokázáno, že zmenšení velikosti krystalitů ZnO pod cca 100 nm vede k výraznému zvýšení rozpustnosti TM v ZnO. Cílem tohoto příspěvku je experimentální a teoretické studium systému Zn-Co-O a posouzení vlivu velikosti částic na rovnováhu (Zn,Co)O(wz)-$(Zn,Co)Co_2O_4$(sp).

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2013).

[1] Mandal SK, Das AK, Nath TK, Karmakar D (2006) Temperature dependence of solubility limits of transition metals (Co, Mn, Fe, Ni) in ZnO nanoparticles. Appl Phys Lett 89:144105
[2] Straumal BB, Mazilkin AA, Protasova SG, Myatiev AA, Straumal PB, Baretzky B (2008) Increase of Co solubility with decreasing grain size in ZnO. Acta Mater 56:6246–6256

2P05
PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A STUDIUM ANTIMIKROBIÁLNÍCH VLASTNOSTÍ NANOKOMPOZITU AG/PDDA-KŘEMELINA

Aleš Panáček[a,*] , Anna Balzerová[a], Robert Prucek[a], Václav Ranc[a], Renata Večeřová[b],Vendula Husičková[b], Jiří Pechoušek[c], Jan Filip[c], Radek Zbořil[a], Libor Kvítek[a]

[a] *Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17.listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika*
[b] *Ústav mikrobiologie, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Hněvotínská 5, 775 15 Olomouc, Česká republika*
[c] *Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra experimentální fyziky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17.listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika*

Připravili jsme a charakterizovali nanokompozit obsahující nanočástice stříbra na křemelině s vysokou antimikrobiální aktivitou. K přípravě nanokompozitů byly použity stříbrné nanočástice s průměrnou velikostí 28 nm připravené modifikovanou Tollensovou metodou. Jako mezivrstva mezi křemelinou a nanočásticemi stříbra byl použit poly(diallyl-dimethylammonium) chlorid (PDDA), který umožnil změnu původně záporného náboje křemeliny na kladný. Díky silným elektrostatickým interakcím mezi záporně nabitými nanočásticemi a kladně nabitým povrchem křemeliny modifikované PDDA byl připraven nanokompozit Ag/PDDA-křemelina s vysokým obsahem stříbra (až 46,6 mg Ag/ 1 g křemeliny). Uvolňování stříbra z připravených nanokompozitů je minimální (<0,3 mg Ag/ 1 g nanokompozitu) a proto nejsou škodlivé pro životní prostředí. Všechny připravené nanokompozity vykazují vysokou antibakteriální aktivitu vůči gram-pozitivním a gram-negativním bakteriím a fungicidní aktivitu vůči kvasinkám. U vybraného nanokompozitu byla navíc studována rychlost letálního účinku vůči bakterii *E. coli* (při koncentraci nanokompozitu 0,86 g/L dochází k usmrcení všech bakterií po 30 minutách).

Tato práce byla podpořena projekty OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, GAČR GAP304/10/1316, TAČR TE01010218 a vnitřním grantem UP Olomouc PrF_2013_031.

2P06
THE APPLICATION OF FILLERS BASED ON MODIFIED CLAY MATERIALS IN RUBBER COMPOUNDS

M. Pajtášová[1], D. Ondrušová[1], Z. Jankurová[1], K. Holcová[1], E. Jóna[1], J. Palieskova[1]

[1]*Univerzity of Alexander Dubček in Trenčín, Faculty of Industrial Technologies in Púchov. mariana.pajtasova@fpt.tnuni.sk*

The goal of the polymer/clay mineral composite sciences is not only to fill a matrix with nanometer sized particles, but also to modify the matrix texture by interaction with nano-fillers during processing, in order to make new functional materials, especially with improved mechanical properties.The organo-clays produced by treatment of clay minerals, with organics have a lot of applications in many fields of industry due to their high surface area, specific active sites and attractive adsorptive properties.The present work deals with the study of monoionic and organomodified forms of clay materials on the basis of layered silicates of structural type 2:1 as well as their application as fillers in rubber industry. The characteristics of the montmorillonite fillers were studied by spectral and thermal analysis. These fillers were used to preparation of the natural rubber compounds, which were submitted to measurements of vulcanizing characteristics, physical-mechanical and dynamic-mechanical-thermal properties [1-3].

This work has been supported by VEGA No. 1/0530/11 and KEGA No. 007 TnUAD – 4/2013.

[1] ĽALÍKOVÁ S, PAJTÁŠOVÁ M, ONDRUŠOVÁ D, BAZYLÁKOVÁ T, OLŠOVSKÝ M, JÓNA E, MOJUMDAR SC.: Thermal and spectral properties of natural bentonites and their application as reinforced nanofillers in polymeric materials, *J. Therm. Anal. Calorim.* 2010;100: 745-749.

[2] LIPTÁKOVÁ, T., ALEXY, P., GONDÁR, E., KHUNOVÁ, V.: Polymérne konštrukčné materiály. Žilina 2012. 189s. ISBN 978-80-554-0505-6.

[3] VAVRO, J., HAJSKÁ, H., VAVRO, J.jr., KOVÁČIKOVÁ, P.: Analysis of the Defects in Tyres for freight Vehicles at the dynamic Loading, *Machine Modelling and Simulations*. - Poznaň : Politechnika Pozňanska, 2012. 193 - 200- ISBN 978-83-923315-2-0.

2P07
SYNTÉZA A OVLIVNĚNÍ VLASTNOSTÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PŘÍRODNÍMI LÁTKAMI

Martin Sivera[1], Libor Kvítek[1], Aleš Panáček[1]

[1] *Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, Olomouc 779 00, MartinSivera@seznam.cz*

V posledních letech patří studium a příprava nanočástic stříbra k jedné z nejintenzivněji se rozvíjejících oblastí v nanotechnologickém výzkumu. Nanočástice stříbra (ale i dalších kovů) mají řadu velmi unikátních vlastností, díky kterým se již uplatňují v řadě komerčních výrobků (např. textil, kosmetika i zdravotnické materiály). Tyto produkty využívají jejich výborných antibakteriálních vlastností [1,2]. Nanočástice stříbra lze využít také pro jejich optické vlastnosti v některých instrumentálních technikách. Používají se např. u fluorescenční spektroskopie a povrchem zesílené Ramanovi spektroskopie (SERS). Další oblastí využití je katalýza, kdy je možné pomocí nanočástic katalyzovat odbourávání rady polutantů. Lze je také použít ke konstrukci chemických senzorů a biosenzorů [3].

Hlavním problémem nanočástic stříbra je agregace, způsobující ztrátu jejich unikátních vlastností. Proto se výzkum zaměřuje na hledání vhodných látek, které zvyšují jejich agregátní stabilitu. Použitím přírodních můžeme pozitivně ovlivnit toxikologické vlastnosti a biodegradabilitu bez ovlivnění aplikačního využití [2].

Cílem práce bylo studium vlivu přírodních látek (např. želatiny, hydroxyethyl celulózy, kyseliny hyaluronové/hyaluronátu sodného, xantanové gumy) na vlastnosti nanočástic stříbra. Nanočástice byly připraveny modifikovanou Tollensovou metodou. K charakterizaci nanočástic stříbra byla použita UV/VIS spektrometrie, dynamický rozptyl světla (DLS) a transmisní elektronový mikroskop (TEM). Sledovanými parametry byla velikost, dlouhodobá stabilita, agregátní stabilita a antibakteriální aktivita (standardní diluční mikrometoda).

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI CZ.1.05/2.1.00/03.0058, GAČR GAP304/10/1316, OPVK 2.3 CZ.1.07/2.3.00/20.0056 a vnitřního grantu UP Olomouc PřF_2013_031.

[1] Kvítek L., Panáček A., Soukupová J., Kolář M., Večeřová J., Prucek R., Holecová M., Zbořil R.: J. Phys. Chem. C 112, 5825 (2008).
[2] Wei D., Sun W., Qian W., Ye Y., Ma X.: Carbohydr. Res. 334 (2009).
[3] Kvítek L., Prucek R., Panáček A., Novotný R., Hrbáč J., Zbořil R.: J. Mat. Chem. 15, 1099 (2005).

2P08
PŘÍPRAVA A KATALYTICKÉ VLASTNOSTI NANOAG@MMT KOMPOZITNÍHO MATERIÁLU

Martina Karlíková[1], Libor Kvítek[1], Aleš Panáček[1], Jan Filip[2], Jiří Pechoušek[2]

[1]Katedra fyzikální chemie, PřF UP, tř. 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc. [2]Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Šlechtitelů 11, 78371 Olomouc. Martina.Karlikova@upol.cz

Nanočástice ušlechtilých kovů jsou intenzivně studovány z důvodu jejich unikátních optických, elektrických a katalytických vlastností, které jsou odlišné od vlastností týž makroskopických objektů. Užití nanočástic v praktických aplikacích je však spojeno s velmi diskutovaným problémem jejich případné toxicity vůči životnímu prostředí. Jedním ze způsobů, jak zamezit uvolňování nanočástic do prostředí, za současného zachování jejich unikátních vlastností, je zakotvení těchto částic na pevném substrátu.

Naše pozornost byla zaměřena na přípravu a katalytickou aktivitu kompozitního materiálu obsahujícího nanočástice stříbra (AgNPs), které byly zakotveny na jílovém minerálu montmorillonitu. Kompozitní materiál byl připraven prostou adsorpcí AgNPs z vodné disperze nanočástic, připravené modifikovaným Tollensovým procesem [1]. Naadsorbované množství Ag bylo stanoveno pomocí atomové absorpční spektrometrie. Připravené nano-kompozitní materiály byly charakterizovány metodou RTG práškové difrakce a získaná data byla podpořena TEM snímky materiálů. Katalytická aktivita připraveného kompozitu byla studována na modelové reakci redukce 4-nitrofenolu na 4-aminofenol v nadbytku redukčního činidla, kterým byl tetra-hydridoboritan sodný. Průběh reakce byl sledován pomocí UV-Vis spektroskopie, ze spektrálních změn absorpčního píku 4-nitorfenolu při 400 nm v čase. Získaná kinetická data byla následně porovnána s hodnotami rychlostních konstant obdržených pro reakci katalyzovanou „volnými“ nanočásticemi Ag v disperzi.

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0058, GAČR GAP304/10/1316, OPVK 2.3 (CZ.1.07/2.3.00/20.0056) a vnitřního grantu UP Olomouc (PřF_2013_031).

[1] Panáček A., Kvítek L., Prucek R., Kolář M., Večeřová R., Pizúrová N., Sharma V.K., Nevěčná T., R. Zbořil: J. Phys. Chem. B 110, 16248 (2006).

2P09
RUBBER ADDITIVES, THEIR INFLUENCE ON RUBBER PROPERTIES AND ENVIRONMENTAL ASPECTS OF PRODUCTION

D. Ondrušová[1], M. Pajtášová[1], L. Špániková[1], S. Domčeková[1], M. Ďurčeková[1]

[1]Univerzity of Alexander Dubček in Trenčín, Faculty of Industrial Technologiesinv Púchov. darina.ondrusova@fpt.tnuni.sk

From the aspect of rubber industry and economical requirements, the priority is hidden in the attempt to be ecologically friendly during the processing of rubber compounds but, on the other side, high quality of final product must be preserved. It means that the main attention is paid to substitution of substances dangerous to health by ecological variants during the process of production. The present work deals with the study of selected rubber additives from the groups of rubber accelerators and fillers. From the group of accelerators the preparation, properties and application of new Co(III) N–ethyl–N–phenyl-dithiocarbamate were studied and ecological rubber accelerators on the basis of dithiophosphates are described too [1]. In the role of mineral fillers in rubber compounds were studied new prepared monoionic and organic forms of natural zeolite clinoptilolite. The vulcanization performance of rubber compounds prepared and physical and mechanical properties of vulcanizates were measured and the efficiency of new prepared accelerators and mineral fillers was evaluated [2,3].

This work has been supported by VEGA No. 1/0530/11 and KEGA No. 007 TnUAD – 4/2013.

[1] ONDRUŠOVÁ, D. , PAJTÁŠOVÁ, M.: *Rubber components and their influence on rubber properties and environmental aspects of production*, 1.vyd. - Krakow : Spolok Slovákov v Poľsku, 2011. - 166 s. – ISBN 978-83-7490-385-1.
[2] VAVRO, J., HAJSKÁ, H., VAVRO, J. jr., VAVROVÁ, A.: The experimental and theoretical Analysis of Separations Extension in personal Tyres. *Metalurgija*. Vol.49, No.2, (2010), 583-586, ISSN 0543-5846.

[3] VAVRO, J., HAJSKÁ, H., VAVRO, J.jr., KOVÁČIKOVÁ, P.: Analysis of the Defects in Tyres for freight Vehicles at the dynamic Loading, *Machine Modelling and Simulations*. - Poznaň : Politechnika Pozňanska, 2012. 193 - 200- ISBN 978-83-923315-2-0.

2P10
THE NANOFILLERS ON THE BASIS OF NATURAL AND SYNTHETIC ZEOLITE AND THEIR INFLUENCE ON PROPERTIES OF THE RUBBER COMPOUNDS

Lenka Špániková, Darina Ondrušová[1], Slavomíra Domčeková[1], Mária Kopcová[1], Katarína Holcová[1]

[1]Fakulta priemyselných technológií so sídlom v Púchove TnUAD v Trenčíne, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov, spanikovalenka88@gmail.com

One of the many reasons for the application of zeolites as light fillers in rubber compounds is replacement of commonly used carbon black which is carcinogenic and its application has a negative impact on the living environment. Natural and synthetic zeolites form a group of aluminosilicate nanoporous materials and they have been used in various flieds of industry and environmental protection. It can be also applied in the role of fillers in the polymeric materials. The well-known type of natural zeolites is clinoptilolite. Its structure is based on threedimensional framework composed of tetrahedral SiO_4 and AlO_4 units. These units are bound by sharing of oxygen atoms and create cavities and pores. There are molecules of water along with weakly bound and easily replaceable cations, e.g. Na^+, K^+ in cavities and pores. Synthetic zeolite Y-sit is intermediate silica zeolite and it is often used as molecular sieve material.[1,2] The properties of zeolites, such as high sorption capacity and ion exchange allow to prepare also their organic forms.

The work deals with preparation of two types of Co^{2+} organozeolite and its application in the function of filler in rubber compounds. The influence of prepared filler on rheological and curing characteristics of rubber compounds is studied as well as the effect of accelerated thermal aging on physical and mechanical properties of vulcanizates is observed. [3]

This work has been supported by VEGA No. 1/0530/11 and KEGA No. 007 TnUAD – 4/2013.

[1] SMART, L., MOORE, E.: *Solid state chemistry: an introduction*, 3rd edition, CRC Press, 2005. 407 p. ISBN 0-7487-7516-1

[2] FLANINGEN, E.M.: *Chapter 2 Zeolites and molecular sieve: An historical perpective*. In: Studies In Surface Science and Catalysis, Vol.137, 2001, p.11-35.

[3] ONDRUŠOVÁ,D.,PAJTÁŠOVÁ,P.: Rubber components and their influence on rubber properties and environmental aspects of production, 2011.166 p. ISBN 978-83-7490-385-1

2P11
MAGNETICKÉ KOMPOZITY NA BÁZI BENTONITU A JEJICH STABILITA V KYSELÉM PROSTŘEDÍ

Martin Mucha[1]

[1]Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, martin.mucha@osu.cz

Jílové minerály, zvláště pak bentonity jsou často používány jako sorbenty různých polutantů. Malé částice však představují problém z hlediska jejich filtrace. Jedním z možných řešení je příprava různých kompozitních materiálů, které je možno separovat například externím magnetickým polem [1-3].

V rámci této práce bylo připraveno celkem 6 materiálů na bázi bentonit/magnetit. Materiály byly připraveny metodou koprecipitace (poměry Fe^{3+}:Fe^{2+} 1:1 a 2:1; poměry Fe:betonitu 1:2, 1:1 a 2:1) a následně byly louženy při různých hodnotách pH (úprava HCl nebo HNO_3), s následným stanovením obsahu železa ve výluzích.

Z pohledu stability materiálů v kyselém prostředí lze kostatovat, že závisí nejen na pH roztoku, ale také na typu obsažených aniontů. V případě úpravy hodnoty pH kyselinou dusičnou dochází k uvolnění menšího množství Fe než v případě použití kyseliny chlorovodíkové. Nejvíce uvolněného železa bylo zaznamenáno při pH 1 (až 86 mg Fe/g materiálu), při pH 3 je již uvolněné množství do 6 mg Fe/g materiálu. Samotný bentonit také obsahuje ve své struktuře železo, část množství uvolněného při pH 1 tak může pocházet ze struktury bentonitu, nikoli z částic magnetitu.

Závěrem lze tedy konstatovat, že při hodnotách pH > 3 již téměř nedochází k rozpouštění materiálů a ty by mohly být použitelné pro sorpční účely.

Tato práce byla podpořena projektem Institut environmentálních technologií (IET) reg. číslo CZ.1.05/2.1.00/03.0100.

[1] Annamária Mockovčiaková, Zuzana Orolínová, Jiří Škvarla: Journal of Hazardous Materials, (2010)
[2] Zuzana Orolínová, Annamária Mockovčiaková: Materials Chemistry and Physics, (2009)
[3] Dongbei WU et at.: Applied Clay Science, (2012)

2P12
HYBRIDNÍ AMINO-AMIDY - NOVÉ *N,N'*-CHELATUJÍCÍ LIGANDY PRO KOVY HLAVNÍCH SKUPIN

Hana Kampová,[1] Emilie Riemlová,[1] Jitka Klikarová,[1] Vladimír Pejchal,[2] Zdeňka Padělková,[1] Aleš Růžička[1]

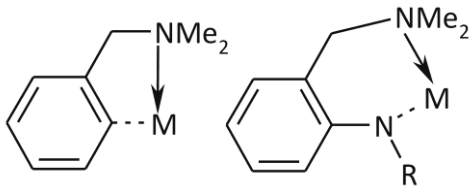
[1]Katedra obecné a anorganické chemie a [2]Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologie, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, ČR. e-mail: ales.ruzicka@upce.cz

Anorganické amidy kovů (obecného vzorce $[R_2N]_nM$) patří mezi nejstudovanější a nejpoužívanější sloučeniny v katalýze i při přípravě nových materiálů.[1] Přestože jedna z prvních prací o této třídě sloučenin byla publikována Lappertem již v roce 1974[2], tyto různě modifikované sloučeniny stále přitahují obdivuhodnou pozornost akademických i průmyslových výzkumníků.

Úspěšná stabilizace nízkovalentních sloučenin kovů 14-té skupiny a speciální chemické vlastnosti sloučenin obsahujících jako ligand 2-[*(*dimethylamino)methyl]fenyl- (obr. 1, vlevo) nás vedla k prozkoumání chemie komplexů obsahujících deriváty [2-(dimethylamino)-methyl]anilinu (obr. 1, vpravo).

Tento ligand obsahuje jak amido skupinu, která vytváří silné kovalentní vazby, tak i amino skupinu vhodnou pro vznik slabší intramolekulární interakce, což může vést ke vzniku hemilabilního šestičlenného diazametalla cyklu, podobně jako u souvisejících β-diketiminatových ligandů.

Poměrně nedávno jsme informovali o struktuře a reaktivitě komplexů kovů 14-té skupiny obsahujících tyto ligandy substituované silylovými skupinami.[3] V tomto příspěvku bude diskutována chemie komplexů obsahujících nesubstituované ligandy, nebo ligandy s objemnou organickou skupinou, a různé kovy, jako Mg, Zn, Ca, Al, atd



Obr. 1 Studované koordinační sloučeniny

Autoři si dovolují poděkovat za podporu Grantové agentuře ČR (Projekt P207/12/0223).

[1] M. F. Lappert, A. V. Protchenko, P. P. Power, A. Seeber, *Metal Amide Chemistry*. John Wiley and Sons, Ltd.: Chichester, U.K., **2009**.
[2] D. H. Harris, M. F. Lappert, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* (1974) 895.
[3] H. Vaňkátová, L. Broeckaert, F. De Proft, R. Olejník, J. Turek, Z. Padělková, A. Růžička, *Inorg. Chem*., 50 (2011) 9454.

2P13
KOMPLEXOTVORNÉ VLASTNOSTI OLIGONITROKALIX[4]ARENŮ

Alan Liška[1,2], Jiří Ludvík[2]

[1]Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Albertov 6, 128 43 Praha 2, alanliska@centrum.cz
[2]Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i., Dolejškova 3/2155, 182 23 Praha 8, jiri.ludvik@jh-inst.cas.cz

Kalixarenový skelet představuje významný strukturní motiv v organické a supramolekulární chemii. Samotný není elektrochemicky aktivní, pro možnost studia kalixarenových derivátů elektrochemickými metodami (polarografie, cyklická voltametrie) je tak nutná přítomnost vhodné redoxní sondy, v tomto případě nitroskupiny.

Cone-tetranitrokalix[4]areny nesoucí alkoxy– skupiny na dolním okraji jsou v prostředí bezvodého DMF redukovány ve třech stupních. První dva děje jsou reverzibilní dvouelektronové, třetí redukční děj je ireverzibilní zhruba dvanáctielektronová široká vlna vedoucí k příslušnému hydroxylaminu.

Právě skutečnost, že přijetí prvních čtyř elektronů probíhá ve dvou potenciálově oddělených krocích, prokazuje „zploštělý“ tvar molekuly v roztoku. Pro objasnění spinového stavu meziproduktů prvních dvou redukčních dějů byla provedena UV-Vis-NIR-ESR-spektroelektro–chemická studie. Ukázalo se, že všechny mají radikálovou povahu, v oligonitroradikálových oligoaniontech tedy nedochází k párování spinů.

Komplexotvorné vlastnosti kalixarenů jsou sice všeobecně známy, ale ve většině prací se jedná

o interakci elektroneutrálního kalixarenu s ionty nebo neutrálními molekulami. Diskutované oligonitrokalix[4]areny však koordinují kationty alkalických kovů teprve ve stavu radikálových aniontů. Kalixarenový ligand je tedy elektrochemicky generovaný, navíc radikálové povahy. V příspěvku jsou uvedeny pozorované komplexotvorné rovnováhy, jejich stechiometrie a konstanty stability příslušných iontových párů. Vzniklé komplexy jsou termodynamicky stabilní, ale kineticky labilní. Limitní stechiometrie jsou diskutovány v souvislosti se sterickou objemností jednotlivých kationtů alkalických kovů v roztoku.

[1] Liška, A., Vojtíšek, P., Fry, A.J., Ludvík, J.: Molecules with Multiple Redox Centers: Electrochemical and Quantum Chemical Investigation of Tetranitrocalix[4]arenes, J. Org. Chem. – odesláno
[2] Liška, A., Vojtíšek, P., Lhoták, P., Ludvík, J.: Molecules with Multiple Redox Centers:Electrochemical Investigation of Mono-, Di-, Tri and Tetranitrocalix[4]arenes – připraveno k odeslání.
[3] Liška, A., Rosenkranz, M., Klíma, J., Dunsch, L., Ludvík, J.: Generation of stable mono-, bi-, tri- and tetra- radical anions during electrochemical reduction of oligo-nitrated calixarene – připraveno k odeslání.

2P14
KRYŠTÁLOVÉ ŠTRUKTÚRY A SPEKTRÁLNO-ŠTRUKTÚRNE KORELÁCIE V TETRAKYANIDOPLATNATANOCH MEDI

Martin Vavra, Ivan Potočňák

Katedra anorganickej chémie PF UPJŠ, Moyzesova 11, 041 54 Košice, martin.vavra@upjs.sk

Kyanidokomplexy vytvárajú vďaka prítomnosti voľného elektrónového páru na atómoch dusíka štruktúry rôznej rozmernosti. Rozmernosť daná kovalentnými väzbami, závisí najmä na kovových centrách a ďalších organických koligandoch. Jedným z cieľov nášho výskumu je príprava nízkorozmerných tetrakyanidoplatnatanov medi s neutrálnymi *N*–donorovými ligandami, ktoré sa od seba odlišujú najmä počtom donorových atómov. Rozdielna dentátnosť blokujúceho liganda spôsobí, že atóm medi je koordinovaný rôznym počtom vzájomne rôzne usporiadaných kyanidových skupín, čo vedie k odlišným typom štruktúr.

Zo sústavy Cu(II) – *N*–donorový ligand – $[Pt(CN)_4]^{2-}$ sme pripravili celkovo 19 nízkorozmerných zlúčenín, ktoré boli charakterizované rôznymi chemickými a fyzikálno–chemickými metódami, vrátane RTG štruktúrnej analýzy. Prvú skupinu predstavujú 4 iónové látky s komplexnými katiónmi s rôznym počtom centrálnych atómov (jeden, tri alebo päť). Druhú skupinu tvorí 12 jednorozmerných zlúčenín, ktoré väčšinou vytvárajú jednoduché reťazce. Tretiu skupinu tvoria 3 dvojrozmerné zlúčeniny vytvárajúce dva typy sietí, odlišujúce sa najmä počtom mostíkových kyanidových skupín na centrálnom atóme platiny (tri resp. štyri).

Spektrálno-štruktúrne korelácie v pripravených zlúčeninách ukázali, že existuje určitá limitná väzbová vzdialenosť Cu–N(kyanido), nad ktorou pre zlúčeniny obsahujúce dve identické koncové a dve identické mostíkové kyanidové skupiny pozorujeme v IČ spektre iba jeden ν(C≡N) pás namiesto očakávaných dvoch.

Táto práca vznikla za podpory grantov APVV–0132–11 a APVV–0014–11.

2P15
AMIDINAT VS. GUANIDINAT CÍNATÝ– OXIDACE A 4+1 OXIDATIVNÍ CYKLOADICE

Tomáš Chlupatý, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička

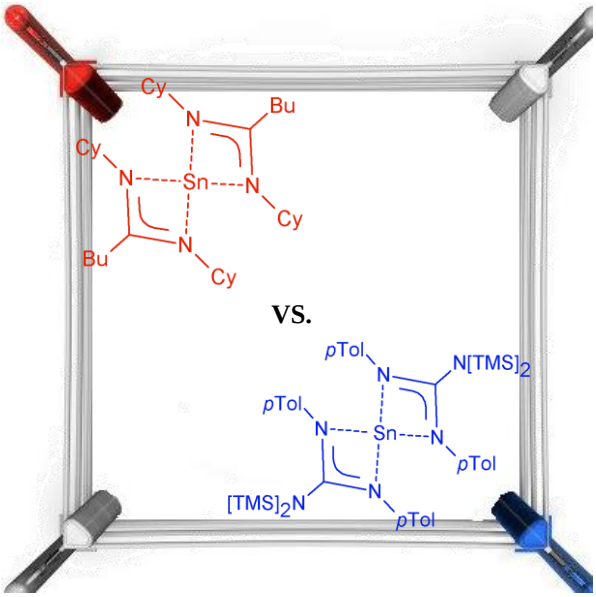
Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika, e-mail: tom-mail@seznam.cz

Amidinatové a guanidinatové ligandy svým podobným strukturním uspořádáním a povahou můžeme řadit do stejné rodiny nenasycených NCN systémů. Avšak jemné nuance ve struktuře, především typ a povaha fragmentu ukotveného na centrálním uhlíkovém atomu, dávají každému ligandu specifické vlastnosti, které se projeví především v reaktivitě celého komplexu. Tento fenomén taktéž ovlivní i povahu centrálního atomu kovu v přítomném diazametalla cyklu.

Jednou z velkých výzev chemie nízkovalentních sloučenin prvků 14 skupiny (a prvků hlavních skupin obecně) stabilizovaných chelatujícími ligandy je využití centrálního atomu kovu k aktivaci malých/větších molekul. V našem případě jsme se zaměřili na dvojici homoleptických stannylenů s amidinatovým[1] resp. guanidinatovým[2] ligandem. Stannyleny

jakožto těžší analoga karbenů poskytují volný elektronový pár na atomu cínu jehož využití v cykloadicních reakcích jako dienofilu se přímo nabízí[3]. Přednáška bude zaměřena na porovnání reaktivity dvou stannylenů s rozdílným typem ligandu v oxidačních reakcích a ve 4+1 oxidativních cykloadicích se sérií dionů s konjugovanými C=O vazbami.

Připravené sloučeniny byly charakterizovány pomocí multinukleární NMR spektroskopie v roztoku a XRD technik.



Autoři děkují Grantové agentuře České republiky (grant č. P207/12/0223) za finanční pomoc.

[1] Chlupatý, T.; Padělková, Z.; Lyčka, A.; Brus, J.; Růžička, A. *Dalton Trans.* **2012**, *41*, 5010-5019.
[2] Chlupatý, T.; Padělková, Z.; DeProft, F.; Willem, R.; Růžička, A. *Organometallics* **2012**, *31*, 2203-2211.
[3] Hillner, K.; Neumann, W. P. *Tetrahedron Lett.* **1986**, *27*, 5347-50.

2P16
BIFUNKČNÍ *β*-DIKETIMINÁTOVÉ A ENANAMINONOVÉ KOMPLEXY KOVŮ

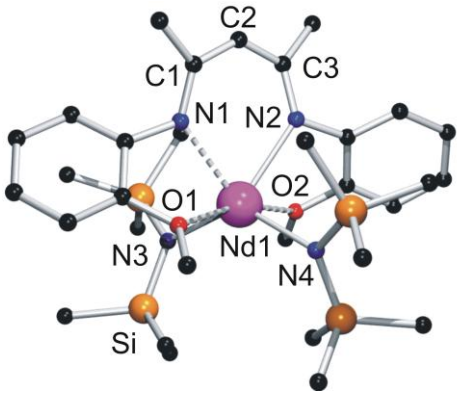
Roman Olejník[1], Zdeňka Padělková[1], Aleš Růžička[1]

[1]*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, CZ-530 02 Pardubice, Česká republika, roman.olejnik@email.cz*

Poměrně snadno elektronicky a stericky modifikovatelné *β*-diketiminány (*BDI*) a enaminony (*ENA*) jsou velmi často používanými ligandy pro stabilizaci kovů v různých, mnohdy netypických, oxidačních stavech [1]. Takovéto komplexy našly uplatnění v organokovové a organické chemii zejména pro jejich katalytickou aktivitu v řadě organických transformací [2]. Přínos naší práce je v přípravě nových bifunkčních *BDI* a *ENA* ligandů obsahujících vhodné donorní skupiny, které se mohou koordinovat k atomu kovu a tím zvýšit stabilitu celého komplexu. Z tohto důvodu bylo připraveno několik takovýchto *BDI* a *ENA* ligandů [3], ale pouze z některých byly syntetizovány odpovídající komplexy (obr. 1).

BDI a *ENA* komplexy byly připraveny nejčastěji z deprotonovaného ligandu a halogenidu kovu (M = Sn, Zn a Ge) nebo z neutrálního ligandu a bis popř. tris(amidu) příslušného kovu (M = Sn, Pb, Ge a Ln). U vybraných komplexů byla dále testována jejich katalytická aktivita v polymeračních (Sm a Sn komplexy) a hydroaminačních reakcí (Ln komlexy).

Všechy sloučeniny byly charakterizovány multinukleární NMR spektroskopií, v některých případech pomocí IČ spektroskopie a XRD technik.



Obr. 1 Jeden z připravených komplexů

Autoři by rádi poděkovali Grantové agentuře České rupubliky za finanční podporu (grant č. P 106/10/0924).

[1] Ferro, L.; Hitchcock, P. B.; Coles, M. P.; Cox, H.; Fulton, J. R. *Inorg. Chem*. **2011**, 50, 1879-1888.
[2] Chisholm, M. H; Gallucci, J. C.; Phomphrai, K. *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 8004-8010.
[3] Olejník, R.; Padělková, Z.; Horáček, M.; Růžička, A. *Main Group Met. Chem*. **2012**, 35, 13-27.

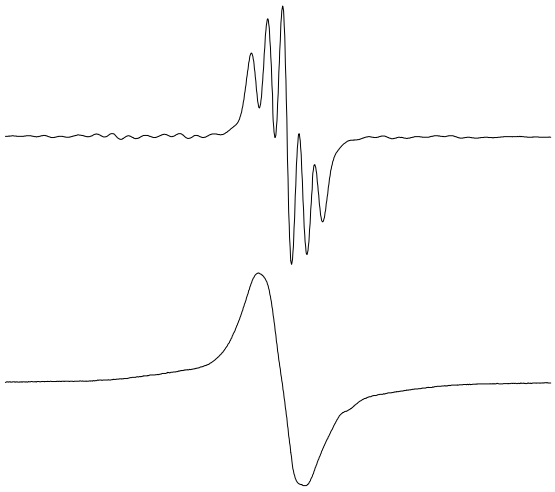
2P17
LINEÁRNÍ A NELINEÁRNÍ PSEUDOHALOGENIDOVÉ DERIVÁTY BIS(CYKLOPENTADIENYL)TITANITÉ

M. Křižan[1], M. Erben[2], J. Vinklárek[2] a Z. Padělková[2]

[1] Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek,
[2] Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická Univerzita Pardubice, Studentská 537, Pardubice, 53210

Halogenidové komplexy typu Cp_2TiX (X = halogen) lze připravit redukcí Cp_2TiX_2 neušlechtilým kovem, která byla popsána již v roce 1955 [1]. V roce 1966 R.Coutts připravil substitucí chloridového iontu ve sloučenině Cp_2TiCl lineárním pseudohalogenidem Y^- (Y = NCS^-, CN^-, NCO^- a N_3^-) odpovídající komplexy Cp_2TiY. Tyto látky byly charakterizovány pouze infračervenou spektroskopií a v případě thiokyanatanového derivátu i EPR spektroskopií v roztoku. Struktura těchto látek však nebyla dosud popsána s výjimkou tetramerního kyanidového komplexu $(Cp_2TiCN)_4$ [2,3].

V této práci byly připraveny a studovány bis(cyklopentadienyl)titanité komplexy typu Cp_2TiY a $[(Me_3Si)C_5H_4]_2TiY$ (Y^- = NCS^-, CN^-, $NCSe^-$, NCO^-, N_3^-, $C(CN)_3^-$, $N(CN)_2^-$ a $CS_2N_3^-$). Vzhledem k přítomnosti jednoho nepárového elektronu mohou být tyto látky studovány EPR spektroskopií. Tetrahydrofuranové roztoky poskytují ve většině případů jednoduchá EPR spektra se satelity, způsobenými interakcí s izotopy titanu ^{47}Ti a ^{49}Ti. Při zvýšení koncentrace pseudohalogenidových aniontů v roztoku bylo v EPR spektrech pozorováno i štěpení signálu zapříčiněné interakcí s dusíkovými atomy ligndů. Tuto změnu lze vysvětlit vznikem aniontových částic typu $[Cp_2TiY_2]^-$. Všechny studované sloučeniny byly také charakterizovány UV-Vis, IR a Ramanovou spektroskopií. U komplexů s pseudo-halogenidovým ligandem CN^-, $C(CN)_3^-$ a $N(CN)_2$ byla RTG difrakční analýzou stanovena molekulová struktura v krystalu.



Obr. 1 EPR spektrum $Cp_2TiC(CN)_3$ v THF nahoře s nadbytkem $C(CN)_3^-$ dole ve stechoimetrickém poměru.

Autoři děkují Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy České republiky za finanční podporu (SG320001).

[1] M. Birmingham, A. K. Fischer, G. Wilkinson: Naturwiss., 42 (1955), p. 96.
[2] R. Coutts P.C. Wailes: Inorg. Nucl. Chem.. Lett. 3 (1967), p. 1.
[3] P. Schinnerling, U. Thewalt: J. Organomet. Chem., 41 (1992), p. 431.

2P18
MOLEKULOVÉ ROZPOZNÁVANIE MALÝCH BIOMOLEKÚL POMOCOU KOMPLEXU ZN^{2+}-CYKLÉN

Zuzana Vargová[1], Ingrida Rostášová[1], Katarína Györyová[1], Petr Hermann[2], Ivan Lukeš[2]

[1]Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P.J.Šafárika v Košiciach, Moyzesova 11, Košice 04154, Slovenská republika, zuzana.vargova@upjs.sk
[2]Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova, Hlavova 2030, Praha 124 80, Česká republika

Prirodzené procesy prírody (samoorganizácia, rozpoznávanie a prispôsobovanie sa molekúl navzájom počas ich vzájomnej interakcie a pod.) sú v súčasnosti hlavným zdrojom informácií, ktoré umožňujú vedcom vytvárať nové receptory, sensory, nosiče prípadne iné hostiteľské molekuly pre praktické aplikácie [1].

V posledných rokoch je venovaná značná pozornosť aj štúdiu vhodných modelových receptorov pre rozpoznávanie významných biosubstrátov ako sú nukleové kyseliny, aminokyseliny či peptidy. Schopnosť rozpoznávať substrát významne prispieva ku

konečnému zloženiu a vlastnostiam modelového receptora. Jednu významnú skupinu tvoria komplexy obsahujúce cyklické tetraamíny, a to hlavne 1,4,7,10-tetraazacyklododekán (cyklén) a 1,4,8,11-tetraazacyklotetradekán (cyklám). Pre tvorbu komplexov iónov kovov s týmito azamakrocyklami zohráva rozhodujúcu úlohu veľkosť ich dutiny a stereoelektrónové požiadavky [2].

Významné zastúpenie zinočnatých iónov v biologických systémoch viedol k tvorbe značného počtu zinočnatých komplexov ako modelových zlúčenín pre takéto systémy. Komplex Zn^{2+}-cyklén, ako základný motív, sa použil ako modelový receptor pre rozpoznávanie nukleobáz v roztoku, hlavne tymínu (T) a uracilu (U) [3]. Vyššie spomenuté poznatky viedli k štúdiu molekulárneho rozpoznávania biomolekúl ako sú napríklad karboxylové kyseliny, aminokyseliny a dipeptidy pomocou umelého receptora Zn^{2+}-cyklén. Štúdie potvrdili schopnosť selektívneho rozpoznávania významných biomolekúl akými sú aminokyseliny, dipeptidy a pyridínkarboxylové kyseliny (nikotínová (vitamín B3), dipikolínová a pikolínová).

[1] Jonathan W. Steed, Jerry L. Atwood: Supramolecular Chemistry, 2. Ed., Wiley-VCH, 2009

[2] E. Kimura, T. Shiota, T. Koike, M. Shiro, M. Kodama: J. Am. Chem. Soc., 1990, 112, 5805-5811

[3] M. Zulkefeli, T. Sogon, K. Takeda, E. Kimura, S. Aoki: Inorg. Chem. 2009, 48, 9567-9578

2P19
FILLING THE GAPS - NOVEL SALTS OF HSO_3F SUPERACID

Tomasz Michalowski[1], Wojciech Grochala[1,2]

[1]Faculty of chemistry, University of Warsaw, Pasteura 1, 02-093 Warszawa, tmichalowski@chem.uw.edu.pl
[2] CENT, University of Warsaw, Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa

Superacids and their derivatives have many applications in academic science and industry. Yet, even after 50 years of research much is still unknown about them[1]. The highly corrosive nature of the compounds and special equipment needed for their handling seems to be a major obstacle in broadening of our understanding this area of chemistry.

The research described here concerns mostly with the salts of the fluorosulfuric acid - HSO_3F. While the fluorosulfuric salts of silver(II) and mixed-valent silver (I/II) - $Ag(SO_3F)_2$[2] and $Ag[I]_2Ag[II](SO_3F)_4$[3] respectively show unusual magnetic properties, it is suprising that structures of many of the simple fluorosulfuric salts were not known until recently. In the course of our research the crystal structures of previously unknown simple fluorosulfuric salts of monovalent metals (Na, Rb, Tl, Ag) were determined [4],[5]. The closed packed $NaSO_3F$ crystallizes in the hexagonal unit cell ($P6_3/mmc$), which has not been previously observed for any other fluorosulfate. $RbSO_3F$ is orthorthombic and isostructural with KSO_3F (Pnma), while $TlSO_3F$ also crystallizes orthorthombic (Pnma) but its crystal structure resembles more that of tetragonal $CsSO_3F$. The related $AgSO_3F$ adopts a unique monoclinic structure type ($P2_1/m$) and it shows substitutional F/O disorder.

[1] G. Olah, "Crossing Conventional Boundaries in Half a Century of Research", J. Org. Chem., 70 (7): 2413-2429, 2005

[2] P. J. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jaglicic, P. J. Leszczyński, T. Michałowski, W. Grochala "Silver(II) Fluorosulfate: A Thermally Fragile Ferromagnetic Derivative of Divalent Silver in an Oxa-Ligand Environment", Eur. J. Inorg. Chem., (16): 2499-2507, 2011

[3] T. Michałowski, P. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jaglicic, P. Leszczyński, W. Grochala "$Ag_3(SO_3F)_4$: A Rare Example of a Mixed-Valent Ag^{II}/Ag^{I} Compound Showing 1D Antiferromagnetism", *Eur. J. Inorg. Chem.*, (16): 2508-2516, **2011**

[4] W. Grochala, M. Ksawery Cyrański, M. Derzsi, T. Michałowski, P. J. Malinowski, Z. Mazej, D. Kurzydłowski, W. Koźmiński, A. Budzianowski, P. J. Leszczyński „Crystal and electronic structure, lattice dynamics and thermal properties of Ag(I)(SO3)R (R = F, CF3) Lewis acids in the solid state", *Dalton Trans.*, (41):, 2034-2047, 2012

[5] Michałowski T, Leszczyński PJ, Cyrański M, Dobrzycki Ł, Budzianowski A, Grochala W "The missing crystal structures of fluorosulfates of monovalent cations: $M(I)SO_3F$, M=Na, Rb and Tl", J FLUOR CHEM 40(8): 116-120 2012

2P20
PHOTOGENERATION OF CHARGE CARRIERS IN POLY(N-VINYLCARBAZOLE) DOPED WITH 2,4,7-TRINITROFLUORENONE AND TRIS(2-PHENYLPYRIDINE) IRIDIUM

Anna Stefaniuk[1,2,3], Jarosław Jung[2], Ireneusz Głowacki[2]

1. Polish Chemical Society, ul. Freta 1, 00-227 Warszawa
2. Department of Molecular Physics, Faculty of Chemistry, Lodz University of Technology, ul. Zeromskiego 116, 90-924 Lodz, Poland
3. e-mail: anna.stefaniuk@hotmail.com

One of the most important value for determining the electrical properties of the photoconductor is photogeneration quantum efficiency (the probability of electron-hole pairs generation after illumination).

Poly(N-vinylcarbazole) (PVK) is a commonly used compound in the photoconductive systems, such as PVK doped with 2,4,7-trinitrofluorenone (TNF), which has a high photogeneration quantum yield in the visible light range. PVK is also used in light emitting devices like light-emitting diodes [2]. It is a matrix for low molecular weight compounds showing photoluminescence, such as tris(2 - phenylpyridine) iridium ($Ir(ppy)_3$) which emits the green light. Such dopant constitutes the energy trap for charge carriers.

This paper presents the results of photoconductivity of PVK and PVK doped with TNF and $Ir(ppy)_3$. The measurements were performed using the xerographic discharge method. Based on the surface potential decays curves the photogeneration quantum yield of charge carriers for measured samples, as well as the analysis of the impact of impurities on the flow of photocurrent in the system PVK + Ir(ppy)3 was determined. It has been shown, that the 2 wt%. dopant of Ir(ppy)3 significantly reduces the photoconductivity of the studied systems, what confirms previous studies of quenching of the excited states in the system PVK + $Ir(ppy)_3$ [3].

[1] I. Glowacki, J. Jung, J. Ulański J, A. Rybak, *Elsevier*, Amsterdam, p.847-877 (2012)**;**
[2] S. Mulani, M. Xiao, S. Wang, Y. Chen, J. Peng, Y. Meng, *RSC Advances*, vol. 3, p. 215-220 (2013);
[3] Z. Szamel, Pułapkowanie i rekombinacja nośników ładunku w polimerowych układach elektrofosforescencyjnych, Praca doktorska, Politechnika Łódzka (2007).

2P21
PROTINÁDOROVĚ AKTIVNÍ PLATNATÉ KOMPLEXY S DERIVÁTY 7-AZAINDOLU

Pavel Štarha[1], Ján Vančo[1], Zdeněk Dvořák[2], Zdeněk Trávníček[1]

[1]Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc; pavel.starha@upol.cz
[2]Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra buněčné biologie a genetiky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 11 Olomouc

Komplexy platiny (např. *cisplatina*, *cis*-diammin-dichloridoplatnatý komplex) jsou v onkologické praxi po několik desetiletí hojně používanou skupinou látek [1]. Zmíněný fakt je jednou z motivací pro hledání nových komplexů platiny, u kterých by byl zvýšen terapeutický účinek a/nebo sníženy vedlejší nežadoucí účinky doprovázející léčbu. Některé z těchto sloučenin se nyní nacházejí v různých fázích klinického testování (např. *picoplatina*, *cis*-ammin-2-methylpyridin-dichloridoplatnatý komplex) nebo byly zavedeny jako nová metaloterapeutika do klinické praxe (např. *nedaplatina*, diammin-glykolatoplatnatý komplex). Mezi biologicky zajímavé a aplikačně nadějné skupiny látek patří platnaté dichlorido komplexy s halogenderiváty 7-azaindolu (*n*aza) obecného vzorce *cis*-$[PtCl_2(naza)_2]$ [2,3]. Výhodou těchto látek je jednoduchá příprava a izolace vedoucí k izomericky čistému produktu, jak prokazuje kombinace rentgenové strukturní analýzy a NMR spektroskopie. U látek byla studována *in vitro* protinádorová aktivita vůči osmi lidským nádorovým buněčným liniím zahrnujícím linii v praxi léčenou substancemi na bázi platiny (karcinom vaječníku), linii resistentní vůči *cisplatině* (*cisplatina* resistentní karcinom vaječníku) a linie, které nejsou běžně léčeny platnatými metaloterapeutiky (např. osteosarkom). Studované komplexy vykazovaly na většině linií signifikantně vyšší aktivitu než *cisplatina* a také schopnost překonávat resistenci nádorových buněk vůči *cisplatině*. Celkově pozitivnější biologické účinky ve srovnání s *cisplatinou* byly pro tyto látky potvrzeny také na *in vivo* myším modelu lymfocytární leukemie L1210.

Výzkum je finančně podporován projekty P207/11/0841, CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a CZ.1.07/2.3.00/20.0017.

[1] Lloyd Kelland: Nat. Rev. Cancer, 7 (2007) 53
[2] Pavel Štarha, Zdeněk Trávníček, Alexandr Popa, Igor Popa, Tereza Muchová, Viktor Brabec: J. Inorg. Biochem., 115 (2012) 57
[3] Tereza Muchová, Jitka Prachařová, Pavel Štarha, Radana Olivová, Oldřich Vrána, Barbora Benešová, Jana Kašpárková, Zdeněk Trávníček, Viktor Brabec: J. Biol. Inorg. Chem., 18 (2013) 579

2P22
STUDIUM KINETICKÝCH A TERMODYNAMICKÝCH VLASTOSTÍ KOVOVÝCH KOMPLEXŮ S MODIFIKOVANÝMI TETRAAZAMAKROCYKLICKÝMI LIGANDY

Radek Ševčík[1,2], Jakub Vaněk[1,3], Přemysl Lubal[1,3] Zuzana Kotková[4], Jan Kotek[4], Petr Hermann[4]

[1]Masarykova univerzita, Ústav chemie, Kotlářská 2, 611 37 Brno, sevcikradek@atlas.cz
[2]Ústav teoretické a aplikované mechaniky AV ČR, v.v.i., Prosecká 809/76, 190 00 Praha 9
[3]Středoevropský technologický institut (CEITEC), Masarykova univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno
[4]Univerzita Karlova, Katedra anorganické chemie, Hlavova 2030/8, 128 43 Praha

Tetraazamakrocyklické ligandy s koordinujícími funkčními skupinami tvoří stabilní komplexy s velkým množstvím kovových iontů a jejich vlastnosti (např. vysoká termodynamická stabilita a kinetická inertnost) je předurčily k aplikaci v medicíně, protože je nutné zamezit uvolňování použitých toxických kovů v lidském těle a rovněž kompetitivním reakcím s ligandy a kovovými ionty přirozeně se vyskytujícími v lidském těle , např. aminokyseliny, fosfáty, peptidy, Ca(II) a Zn(II) ionty. K vyhodnocení potenciálního použití těchto komplexů v biomedicínských aplikacích je proto nutné získat základní znalosti nejen o jejich termodynamických, ale také kinetických vlastnostech.

V této práci je studována formační a disociační kinetika Cu(II) a některých Ln(III) komplexů s makrocyklickými ligandy cyklenového typu (cyklen = 1,4,7,10–tetraazacyklododekan) s karboxylovými nebo funkčními skupinami obsahujícími fosfor pomocí molekulové absorpční spektrometrie, luminiscenční spektrometrie v ustáleném stavu a časově rozlišeném režimu.

Děkujeme Ministerstvu školství, mládeže a tělovýchovy ČR (granty ME09065, MSM0021620857, CEITEC CZ.1.05/1.1.0/02.0068) a Grantové Agentuře ČR (grant 13-08336S) za poskytnutou finanční podporu.

2P23
SYNTÉZA PEROVSKITŮ TYPU $BaSn_{1-x-y}Tb_xZr_yO_3$

Petra Luňáková, Miroslav Trojan, Jakub Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, petra.lunakova@student.upce.cz

Pigmenty jsou práškové látky, které po rozptýlení ve vhodném prostředí toto prostředí zneprůhledňují, vybarvují nebo mu dodávají speciální vlastnosti (např. antikorozní vlastnosti, lesklý a perleťový vzhled, luminiscenci, nebo mají vysokou chemickou a termickou stabilitu. Vysokoteplotní pigmenty jsou látky s vysokou termickou stabilitou a chemickou odolností většinou i vůči taveninám glazur. Musí být barevně stabilní v průběhu výpalu výrobku a také musí odolávat atmosféře ve vypalovacích pecích [1].

Byly připraveny žluté a žluto-zelené keramické pigmenty na základě oxidu SnO_2 s $BaCO_3$ a $BaSO_4$. Do směsí pro syntézu pigmentů byl přidáván také Tb_4O_7 a zirkoničité suroviny (ZrO_2, $ZrSiO_4$, $Zr(SO_4)_2.5H_2O$). Pigmenty byly získány klasickým způsobem a poté aplikovány do organického pojiva v plném tónu a keramické glazury. Barevné vlastnosti těchto surovin byly měřeny v barevném prostoru CIE L*a*b* ve viditelné oblasti světla. Pro charakterizaci práškových pigmentů byla použita rentgenová difrakční analýza.

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován IGA Univerzity Pardubice SGFChT 04.

[1] M. Novotný, Z. Šolc, M. Trojan: Kirk-Othmer Enc. of Chem. Technology – Inorganic Pigments, (1996)

2P24
HYDROGEN BONDED MOLECULAR CRYSTALS - PROSPECTIVE NOVEL NLO MATERIALS

Ivan Němec[1], Irena Matulková[1], Michaela Fridrichová[1], Jana Mathauserová[1], Matouš Kloda[1], Petr Němec[2], Ivana Císařová[1]

[1]Charles University in Prague, Faculty of Science, Department of Inorganic Chemistry, Hlavova 8, 128 40 Praha 2, Czech Republic, agnemec@natur.cuni.cz
[2]Charles University in Prague, Faculty of Mathematics and Physics, Department of Chemical Physics and Optics, Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2, Czech Republic

In this contribution we are presenting selected results concerning novel materials for non-linear optics (NLO). The current scientific concern in this field is primarily motivated by their applications in the area of new laser frequency generators, optical communication and optical signal processing, as well as data storage and other information processing tasks.

The promising target group of materials are hydrogen-bonded molecular crystals based on selected polarizable organic molecules, which generally act as carriers of NLO properties. These materials range from uncharged cocrystals to ionic salt crystals and frequently exhibit interesting optical properties based on $\chi^{(2)}$- and $\chi^{(3)}$- nonlinearities. The prepared materials are attractive as second harmonic generators (SHG) and efficient laser frequency converters based on stimulated Raman scattering (SRS) phenomenon [1].

Our contribution is especially focused on combination of vibrational spectroscopic methods with other experimental techniques (optical characterization, X-ray diffraction, calorimetry) and quantum chemical computations, which provide unique information concerning symmetry, molecular and phase composition, bonding interactions, phase transitions etc. The studied hydrogen-bonded molecular crystals are based on selected heteroaromatic amines (e.g. aminopyrimidines, aminothiadiazoles and guanylurea).

This work was supported by the long term Research Plan of the Ministry of Education of the Czech Republic No. MSM0021620857.

[1] G. Eckhardt, R.W. Hellwarth, F.J. McClung, S.E. Schwarz, D. Weiner, and E.J. Woodbury: Phys. Rev. Lett. 9, 455 (1962).

2P25
$CaSnSiO_5$ S PŘÍDAVKEM CHROMU

Marcela Zvonková, Jana Luxová, Jakub Trojan, Miroslav Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko – technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ĆR, marcela.zvonkova@student.upce.cz

Tato práce je zaměřena na syntézu malayaiátových pigmentů typu $CaSnSiO_5$ s přídavkem chromu. Syntéza těchto pigmentů proběhla reakcí v pevné fázi [1] za použití $CaCO_3$, SnO_2, Cr_2O_3, SiO_2 a oxidu příslušného lanthanoidu. Výchozí látky byly ve stechiometrickém poměru zhomogenizovány a poté převedeny do korundových kelímků. Kalcinace v elektrické peci probíhala v rozmezí teplot 1200 až 1450°C po dobu tří hodin. Po výpalu proběhla aplikace příslušných pigmentů do glazury P07410 a do organického pojivového systému. Barevné vlastnosti byly proměřeny spektrofotometrem ColorQuest XE (Hunter Lab., USA) k získání trichromatických souřadnic a spektrálních dat a popsány pomocí barevného prostoru CIE L*a*b* [2]. Práce byla zaměřena také na hodnocení barevného odstínu a sytosti pigmentů a vlivu přídavku daného lanthanoidu (La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Zb, Lu a Y). Zároveň byl sledován i vliv teploty na barevné souřadnice a* a b*. Vyhodnocením získaných výsledků bylo zjištěno, že zkoumané pigmenty byly připraveny v široké škále barev. Barevný vzhled glazurovaných kachlí se pohyboval od světle růžového do tmavěrůžového odstínu. V případě aplikace do organické matrice se barva pigmentu pohybovala od žlutohnědé, světlehnědé a tmavě hnědé barvy, přičemž odstíny barev byly ovlivňovány více faktory.

Výzkum proběhl za podpory projektu IGA Univerzity Pardubice SGFCHT 04.

[1] Giuseppe Parravano, Reactions in the solid state, Chem. Eng. News. Archive, (1962)
[2] Petra Šulcová, Experimentální metody v anorganické technologii, Univerzita Pardubice, Pardubice (2008)

2P26
SORPČNÉ VLASTNOSTI A KATALYTICKÁ AKTIVITA NOVÝCH ZLÚČENÍN TYPU METAL-ORGANIC FRAMEWORKS

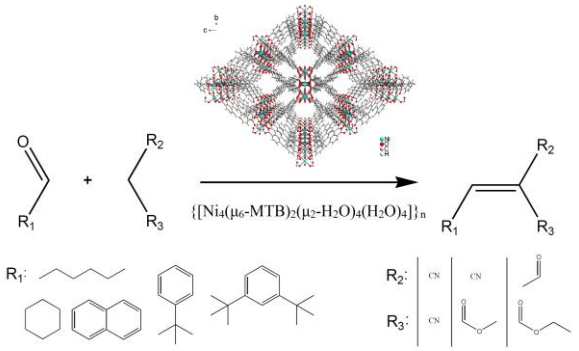
Miroslav Almáši[1], Vladimír Zeleňák[1], Róbert Gyepes[2], Juraj Kuchár[1], Jiří Čejka[3]

[1]*Katedra anorganickej chémie, Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, miroslav.almasi@student.upjs.sk*
[2]*Pedagogická fakulta, Univerzita J. Selyeho, Bratislavská cesta 3322, 945 01 Komárno, Slovenská republika*
[3]*Oddelenie katylýzy a syntézy, Heyrovského inštitút fyzikálnej chémie, Akadémia vied Českej republiky (AVČR), Dolejškova 2155/3, 182 23 Praha, Česká republika*

Príprava, štúdium vlastností a aplikácií zlúčenín typu metal-organic frameworks (MOF) je jednou z najperspektívnejších oblastí dnešnej materiálovej a anorganickej chémie. Zlúčeniny pod označením MOF sa ukazujú zaujímavé z viacerých praktických hľadísk ako nosiče liečiv, katalyzátory alebo sú perspektívne pre separáciu a záchyt technologicky dôležitých plynov, predovšetkým divodíka ako paliva budúcnosti, respektíve oxidu uhličitého ako hlavnej zložky skleníkových plynov [1].

Metal-organic frameworks možno definovať ako polymérne komplexné zlúčeniny skladajúce sa z katiónov prechodných kovov (konektorov), ktoré sú premostené pomocou organických ligandov (linkerov), pričom výsledný dizajn štruktúry a jej rozmernosť závisia od voľby stavebných častíc [2].

V prednáške budú prezentované koordinačné polyméry na báze rôzne rozmerných karboxylových kyselín: od kyseliny mravčej, ktorá reprezentuje najmenšiu a najjednoduchšiu karboxylovú kyselinu (HFOR), ďalej kyselinu trimesovú (H_3BTC), až najobjemnejšiu kyselinu metántetrabenzoovú (H_4MTB) [3] v kombinácii s prechodnými (Ni^{2+}, Zn^{2+}) a vnútorne prechodnými prvkami (La^{3+} - Gd^{3+}). U pripravených zlúčenín typu MOF bude prezentovaná závislosť medzi veľkosťou pórov, ich sorpčnými vlastnosťami didusíka, oxidu uhličitého a zároveň katalytickou aktivitou testovanou v Knoevegenalovej kondenzácii rôzne romerných aldehydov (heptanal, cyklohexán karbaldehyd, benzaldehyd, 4-tert-butyl-benzaldehyd, 3,5-ditert-butyl-benzaldehyd a 2-naftaldehyd) a metylénových zlúčenín (malononiril, metylkyanoacetát a etylacetoacetát) viď obr. 1.



Obr. 1 Knoevenagelova kondenzácia rôzne rozmerných aldehydov a metylénových zlúčenín.

Táto práca vnikla s podporou projektov VEGA 1/0583/11, APVV 0132-11, DESY/HASYLAB I-20110282 EC a VVGS 31/12-13

[1] H. J. Park, M. P. Suh: Chem. Commun., (2010)
[2] A.Y. Robin, K.M. Fromm, Coord. Chem. Rev., (2006)
[3] M. Almáši, V. Zeleňák, R. Gyepes, A. Zukal, J. Čejka: Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, (2012)

2P27
STUDY OF COPPER(II) THIOPHENECARBOXYLATE COMPLEXES WITH PYRIDINE AND METHYLPYRIDINE

Vladimír Kuchtanin, Jan Moncoľ, Peter Segľa

Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, SK-81237 Bratislava, Slovakia,vladimir.kuchtanin@stuba.sk

The synthesis and characterization of two monomeric complexes $[Cu(2\text{-Tpc})_2(py)_2(H_2O)]$ (1) and $[Cu(5\text{-Me-2-Tpc})_2(py)_2(H_2O)]$ (2) and seven dimeric complexes $[Cu_2(2\text{-Tpc})_4(py)_2]$ (3), $[Cu_2(2\text{-Tpc})_4(2\text{-pic})_2]$ (4), $[Cu_2(5\text{-Me-2-Tpc})_4(2\text{-pic})_2]$ (5), $[Cu_2(2\text{-Tpc})_4(3\text{-pic})_2]$ (6), $[Cu_2(5\text{-Me-2-Tpc})_4(3\text{-pic})_2]$ (7), $[Cu_2(2\text{-Tpc})_4(4\text{-pic})_2]$ (8), $[Cu_2(5\text{-Me-2-Tpc})_4(4\text{-pic})_2]$ (9) (where 2-Tpc is 2-thiophenecarboxylate, 3-Me-2-Tpc is 3-methyl-2-thiophenecarboxylate, 5-Me-2-Tpc is 5-methyl-2-thiophenecarboxylate, py is pyridine and 2-pic, 3-pic, 4-pic are 2-,3-,4-picolines) are reported. The complexes under study were characterized by electronic, IR, EPR spectroscopy and X-ray structures analysis. The coordination arrangement around each copper(II) atom is a distorted tetragonal pyramidal. The complex molecules of 1 and 2 are connected through hydrogen bonds into 1D networks. The carboxyl group of the

thiophenecarboxylate anions coordinates to the Cu(II) atom as a unidentate (1,2) or as a bidentate briging (3-9) ligand. Obtained EPR pararmeters are in accordance with values reported in literature for such type of complexes.

Acnowlegements: Financial support received from Slovak Research and Development Agency under grant No. APVV-0014-11 an Grant Agency of the Ministry of Education under Grant No. VEGA 1/0472/13.

2P28
STRUCTURAL VARIABILITY AND SUPRAMOLECULAR ISOMERISM OF COPPER(II) CARBOXYLATES WITH N-METHYLNICOTINAMIDE

Ján Moncoľ[1], Jozef Halaška[1], Zuzana Vasková[2]

[1]Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, FCHPT, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-81237 Bratislava, Slovakia, jan.moncol@stuba.sk, [2]Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, SK-84536 Bratislava, Slovakia

Nicotinamide is one of the most extensively studied pyridine derivatives. It is component of the vitamin B complex and the vital coenzyme NAD (nicotinamide adenine dinucleotide), and it is a typical N-donor ligand in crystal engineering and supramolecular chemistry [1]. The nicotinamide as ligand in transition metal complexes creates the hydrogen-bonding coordination networks through carboxamide group [1]. The hydrogen-bonding metal-organic supramolecular systems based on nicotinamide have been intensively studied. On the other hand only few papers report on transition metal complexes with N-methylnicotinamide as hydrogen-bonding linkage agent in supramolecular system [2,3].

In this lecture, crystal structure and supramolecular organization of various mononuclear and dinuclear copper(II) nitro- and halogenobenzoate complexes featuring N-methylnicotinamide with the formulas: $[Cu(Xbz)_2(mna)_2(H_2O)_2]$, $[Cu(Xbz)_2(mna)_2(H_2O)_2]\cdot 2H_2O$, $[Cu(Xbz)_2(mna)_2(H_2O)_2]\cdot H_2O$, $[Cu(Xbz)_2(mna)_2(H_2O)]\cdot 2H_2O$, $[Cu(Xbz)_2(mna)_2(H_2O)]$ and $[Cu(Xbz)_2(mna)]$ (mna = N-methylnicotinamide, Xbz are various halogeno- or nitrobenzoate anions) will be presented. The hydrogen bonding networks and supramolecular isomerism will be also discussed.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (Grant APVV-0014-11) and Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences (Grants 1/0052/11 and 1/0221/13).

[1] A.M. Beatty: Coord. Chem. Rev. 246 (2003) 131.
[2] J. Moncol, M. Múdra, P. Lönnecke, M. Hewitt, M. Valko, H. Morris, J. Švorec, M. Melnik, M. Mazúr, M. Koman: Inorg. Chim. Acta 360 (2007) 3213.
[3] V. Kuchtanín, J. Moncol, J. Mrozinski, B. Kalinska, Z. Padělková, J. Švorec, P. Segľa, M. Melnik: Polyhedron 50 (2013) 546.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 3: ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3P01
TERMORESPONSIVNÍ POLYMERNÍ MICELY A NANOČÁSTICE: POTENCIÁLNÍ NOSIČE RADIOFARMAK

Martin Hrubý,[1] Jan Kučka[1], Jiří Pánek,[1] Hana Macková[1], Sergey K. Filippov,[1] Anna Yu. Bogomolova[1], Ondřej Sedláček[1], Mariia Rabyk,[1] Richard Hoogenboom[2], Bryn Monnery[2], Andrès Ciolino[3], Petr Štěpánek[1]

[1]Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika; e-mail: mhruby@centrum.cz; [2]Supramolecular Chemistry Group, Department of Organic Chemistry, Ghent University, Krijgslaan 281 S4, B-9000 Ghent, Belgium, [3]Planta Piloto de Ingeniería Química, PLAPIQUI (UNS-CONICET), 8000 Bahía Blanca, Argentina

Polymerní micely s termoresponsivním jádrem a hydrofilním obalem představují slibné polymerní nosiče pro směrování protinádorových léčiv, protože vykazují silné pasivní hromadění v tkáni pevných nádorů EPR efektem. Pro EPR efekt je rozhodující dostatečně vysoká molekulová hmotnost konjugátu; aby se však polymerní nosič vylučoval z organismu ledvinami, je třeba, aby jeho molekulová hmotnost byla pod renálním prahem [cca 40–45 kDa pro (meth)akrylamidové polymery]. Právě micelární nosiče umožňují dosáhnout zároveň dostatečně vysoké zdánlivé molekulové hmotnosti (micela) i vyloučitelnosti (unimer), kdy postupné vylučováni unimeru ledvinami vede díky rovnováze unimer-micela k rozpadu zbývajících micel. Pokud není nerozpustný blok tvořící jádro micely hydrofóbní, ale je termoresponsivní (s kritickou micelární teplotou nastavenou do okolí fyziologické teploty), výrazně se tím zjednoduší příprava micel na prosté ohřátí vodného roztoku To je výhodné zejména pro radiodiagnostika s relativně krátkým poločasem rozpadu, u kterých příprava finálního produktu nemůže být časově příliš náročná.

V příspěvku budou srovnány tři typy termoresponsivních polymerních nosičů radionuklidů [1] lišící se použitým konstrukčním materálem i architekturou: nosič na bázi roubovaného kopolymeru poly[*N*-isopropylakrylamid – *graft* – *N*-(2-hydroxypropylmethakrylamidu] s *N*-glykosylaminovou hydrolyticky labilní vazbou mezi základním polymerem a polymerními rouby, nosič na bázi poly[2-methyl-2-oxazolin – *block* – (2-isopropyl-2-oxazolin – *co* – 2-butyl-2-oxazolin) – *block* – 2-methyl-2-oxazolinu] [2] a polymerní nanočásticový systém na bázi poly(2-isopropyl-2-oxazolin – *co* – 2-butyl-2-oxazolinu) stabilizovaného detergentem Pluronic F127.[3]

Tato práce vznikla za podpory grantu Akademie věd České republiky č. M200501201, grantu 2012CZ006 Akademie věd České republiky – bilaterální spolupráce s Argentinou a grantu Ministerstva průmyslu a obchodu č. TIP FRTI4/625.

[1] Sedláček O, Monnery BD, Filippov SK, Hoogenboom R, Hrubý M.: Macromol. Rapid Commun. 2012, 33, 1648-1662.
[2] Hrubý M. Filippov SK, Pánek J, Nováková M, Macková H, Kučka J, Větvička D, Ulbrich K: Macromol. Biosci. 2010, 10, 916–924.
[3] Pánek J, Filippov SK, Hrubý M, Rabyk M, Bogomolova A, Kučka J, Štěpánek P.: Macromol. Rapid Commun. 2012, 33, 1683-1689.

3P02
MODIFIKÁCIE GLYKOGÉNU, CIELENÉ NÁDOROVÉ DIAGNOSTIKUM, MAKROPORÉZNY SCAFFOLD

Miroslav Vetrík, Sergej Filippov, Ondrej Sedláček, Martin Přádný, Petr Štepánek, Martin Hrubý

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, Česká republika, vetrix@seznam.cz

Glykogén je polysacharid, slúžiaci ako hlavný zásobný zdroj energie zvierat. Energia prijatá potravou sa ukladá v podobe glykogénu, hlavne vo svaloch a pečeni. Glykogén sa skladá z D-glukózových jednotiek monoméru prepojených α(1-4) väzbami, vetviacimi sa na mieste α(1-6) v polohe D-glukózy, vytvárajúci dendrimér, je štrukturálne podobný dextrínu. Z rozboru glykogénovej štruktúry vyplýva, že polysacharid má guľovitú štruktúru. Molárna hmotnosť glykogénu je nad renálnym prahom. Biodegradácia prebieha až po internalizácii glykogénu vo vnútri bunke. Miesto, kde sa odohráva biodegradácia glykogénu (bunka), môže byť s výhodou využité v mnohých aplikáciách a glykogén môže potenciálne slúžiť, ako nano-internalizačný nosič, cielený do nádorového tkaniva. Použitím fluorescenčnej značky Dyomics 615 a gadolínia (Gd-DOTA komplexu), ako kontrastnej látky sa z glykogénu stáva nové, cielené diagnostikum. Testy *in vivo* dokazujú, že

vďaka EPR (Enhanced Permeation Efect) [1,2] sa modifikovaný glykogén koncentruje v nádorovom tkanive a umožňuje tak diagnostikovať miesta s nádorovou aktivitou. Ďalšou vlastnosťou glykogénu je formovateľnosť nanovlákien počas lyofilyzácie. Vlákna pripravené týmto jednoduchým postupom umožňujú pripraviť glykogénový scaffold s makroporéznymi vlastnosťami. Samotný glycogénový scaffold musí slúžiť, ako podporná štruktúra, pre novo vzniknuté bunky, ktoré majú prerastať vnútornou štruktúrou scaffoldu. Glykogénové nanovlákna, ktoré sú rozpustné vo vodnom prostredí a v prostredí medzi bunečného matrix by funkciu scaffoldu nemohli plniť, preto sme tento systém modifikovali, graftovaním poly(ethyl kyanoacrylátu) z plynnej fáze. Kyanoacryláty sa používajú ako biokompatibilné adhezívum, v chirurgickej medicíne. Takto modifikovaný glykogén sa stáva vo vode nerozpustný a na základe našich testov sme zachovali biodegradiblitu.

Týmto ďakujeme za finančnú podporu Grantovej Agentúre Českej Republiky grant # P108/10/1560, P208/10/1600 a tak tiež Akademii Vied Českej Republiky grant # M200501201.

[1] A.S. Hoffman, *J.Controlled Release*, **2008**, 132, 153
[2] H. Maeda, *Bioconjugate Chem*, **2010**, 21, 797

3P03
CARBONYL SUBSTITUTED BITHIOPHENE DERIVATIVES – SPECTRAL STUDIES IN SOLUTION AND POLYMER MATRICES

Martin Danko[1], Anita Andicsová[1], Pavol Hrdlovič[1], Dušan Račko[1], Daniel Végh[2], Vladimír Lukeš[3]

[1] *Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia*
[2] *Department of Organic Chemistry, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia*
[3] *Department of Chemical Physics, Slovak University of Technology, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava, Slovakia*

Thiophene, oligothiophenes and poly(thiophenes) have attracted attention due to their electric conducting and spectral properties, and their process-ability based on the solubility in common organic solvents [1]. The fluorescence yield of these derivatives can be modulated using the addition of the simple methyl, hydroxyl or carboxyl groups in position 5´ and it is also dependent on the hydrogen bonding properties of solvent.

In this work, we compare the experimental spectral properties of the basic unsubstituted 2,2'-bithiophene and its various derivatives with carbonyl-containing substituent in position 5. The special attention is paid to the novel combination of the chromophoric carbonyl −CO− pair with the $–CH_3$ (methyl), $−CH_2CN$ (ethylnitril), $−CF_3$ (trifluoromethyl) and $−OCH_3$ (methoxy). The last studied novel molecule contains also strong chromophoric 9H-fluoren-9-ylidenmethyl moiety in position 5´. Interesting electronic effects of substituents on 2,2'-bithiophene moiety on their spectral characteristics were observed in polar solvents and in dichloromethane [2] and in non-polar toluene [3]. These data were compared with spectral data obtained in solid polymer matrices as polystyrene, polymethyl methacrylate and polyvinyl chloride. To gain more information about ground and excited states we performed calculations of molecular orbitals, energy levels and electron densities by model computing.

Acknowledgement
Authors thank grant agency VEGA for support of project 2/0112/13. This work was financially supported by APVV agency through project nr. 0291-11.

[1] G.G. Wallace, G.M. Spinks, L.A.P.Kane-Maguire, P.R. Teasdale, Conductive Electro-active Polymers, Intelligent Polymer Systems, 2009, CRC Press Tayor and Francis Group, 3rd Edition, Boca Raton, London, New York, pp 263.
[2] V. Lukeš, M. Danko, A. Andicsová, P. Hrdlovič, D. Végh, *Synthetic Metals*, 2013, 165(1), 17-26.
[3] M. Danko, A. Andicsová, P. Hrdlovič, D. Račko, D. Végh, *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2013, 12 (7), 1210-1219.

3P04
HYDROGELY NA BÁZI KYS. HYALURONOVÉ A JEJICH VYUŽITÍ V TKÁŇOVÉM INŽENÝRSTVÍ

Lucie Wolfová[1], Martin Pravda[1], Julie Bystroňová[1], Vladimír Velebný[1]

[1] *Contipro Biotech s.r.o., Dolní Dobrouč 401, 561 02, Česká republika, wolfova@contipro.com*

Hyaluronová kyselina (HA) je vysoko-molekulární glykosaminoglykan, který je nezbytnou součástí extracelulární matrix tkání živočišných organismů. Její unikátní fyzikálně chemické a biologické vlastnosti a její vysoká biokompatibilita ji předurčují k využití v oblasti vývoje scaffoldů pro tkáňové inženýrství[1].

Jednou z možných podob těchto scaffoldů jsou hydrogely. V této práci se věnujeme hydrogelům na bázi tyraminovaného derivátu HA, který je schopen podstupovat síťovací reakci pomocí křenové peroxidázy (HRP) a peroxidu vodíku. Tyto deriváty mohou nalézt své využití v oblasti vývoje scaffoldů pro náhradu kloubní chrupavky, viskosuplementaci synoviální tekutiny nebo např. léčbu kostních defektů[3]. Každá z těchto aplikací klade na použitý materiál specifické nároky z pohledu mechanických a viskoelastických vlastností, stability v prostředí organismu, případně možnosti inkorporace buněk do jejich struktury. Nejdůležitější parametry, ovlivňující vlastnosti těchto hydrogelů jsou Mw a stupeň substituce výchozího derivátu HA, jeho koncentrace a koncentrace síťujících činidel. Cílem naší práce bylo zmapovat vliv těchto parametrů na vlastnosti daných hydrogelů a nalézt tak optimum pro splnění požadavků na daný materiál v rámci jednotlivých aplikací.

[1] Kim, I.L., R.L. Mauck, and J.A. Burdick:Biomaterials 32, 8771-8782 (2011).
[2] Li, P.; Raitcheva, D.; Hawes, M.; Moran, N.: Osteoarthritis Cartilage 20, 1336-1346 (2012).
[3] Raines, A.L., Sunwoo, M.; Gertzman, A. A.: J Biomed Mater Res A 96A, 575-583 (2011).

3P05
VLIV (H^3-ALLYL)-(H^5-CYKLO-PENTADIENYL)-DIKARBONYL-MOLYBDENATÉHO KOMPLEXU NA TVORBU FILMU OXOPOLYMERAČNĚ ZASYCHAJÍCÍHO POJIVA NÁTĚROVÉ HMOTY

[1]O. Preininger,[1]J. Honzíček,[2]J. Vinklárek,[2]M. Erben

[1]Univerzita Pardubice, Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Studentská 573, 532 10 Pardubice, tel. +420728 008 945, e-mail: ondrej.preininger@seznam.cz; [2]Univerzita Pardubice, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice

Tato práce se zaměřila na stanovení sikativačních vlastností komplexu molybdenu (η^3-allyl)-(η^5-cyklopentadienyl)-dikarbonylmolybdenatý komplex. Komplexy molybdenu(II) tohoto typu jsou známé jako prekurzory Mo^{VI} katalyzátorů oxidačních reakcí [1] a proto jsme se pokusili aplikovat tento typ komplexů pro studium vlivu sloučenin Mo na rychlost oxopolymeračního zasychání alkydové pryskyřice, jako možné alternativy k sikativům na bázi kobaltu. Snaha nahradit kobalt, nebo alespoň snížit jeho množství v nátěrových hmotách, je vyvíjena hlavně pro možné karcinogenní a genotoxické účinky jeho sloučenin[1]. Pro stanovení sikativační aktivity byla použita: měření tvrdosti na kyvadle Persoz, měření doby zasychání na B. K. drying recorder a měření kinetiky pomocí FTIR spektroskopie[2]. Jako pojivo byl použit alkyd modifikovaný sojovým olejem, střední olejové délky. Z naměřených hodnot vyplývá, že námi studovaná sloučenina vykazuje určité sikativační vlastnosti, ale bohužel nedosahují aktivity komerčně používaných sikativ s obsahem kobaltu. IR spektroskopická měření ukazují, že sikativační vlastnosti studované sloučeniny molybdenu se projevují především na začátku procesu zasychání. V pozdější fázi má již jen slabé sikativační účinky. Proto modelové nátěrové filmy s obsahem Mo dosahovali poměrně dobré doby zasychání, nedosahovaly však tak vysokých hodnot tvrdosti, jako tomu bylo u nátěrových filmů obsahující kobaltnatý sikativ. V další fázi jsme studovali možné snížení obsahu kobaltu v nátěrových hmotách použitím směsí Co- a Mo-komplexu. Přídavkem Mo-komplexu se podařilo podstatně snížit dobu zasychání i při velmi nízkých koncentracích Co. Pomocí IR spektroskopických měření bylo potvrzeno, že přídavek Mo-komplexu, výrazně zkracuje indukční periodu procesu zasychání, která je zřejmě hlavním faktorem pomalého zasychání filmů s nízkým obsahem Co.

Tato práce vznikla za podpory SGFCHT 03/2013.

[1] P. Neves, C. C. L. Pereira, F. A. Almeida Paz, S. Gago, M. Pillinger, C. M. Silva, A. A. Valente, C. C. Romão, I. S. Gonçalves, Cyclopentadienyl molybdenum dicarbonyl η^3-allyl complexes as catalyst precursors for olefin epoxidation. Crystal structures of $Cp´Mo(CO)_2$ (η^3-C_3H_5) (Cp´ = η^5-C_5H_4Me, η^5-$C_5H_4Me_5$), Journal of Organometallic Chemistry 695 (2010) 2311-2319
[2] D Lison,M De Boeck, V Verougstraete,M Kirsch-Volders, Update on the genotoxicity andcarcinogenicity of cobalt compounds, Environmental and Occupational Medicine 58 (2001) 619–625.
[3] Milan Erben, David Veselý, Jaromir Vinklarek, Jan Honzíček, Acyl-substituted ferrocenes as driers for solvent-borne alkyd paints, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 353– 354 (2012) 13– 21

3P06
EFFECT OF ALKYL SUBSTITUENTS ON SPECTROSCOPIC, REDOX AND STRUCTURAL PROPERTIES OF 2,5-BIS(2,2'-BITHIOPHENE-5-YL)-1,3,4-THIADIAZOLE

Kamil Kotwica[1], Ewa Kurach[1], Renata Rybakiewicz[1], Joanna Zapala[2,3], Marek Knor[2], Robert Nowakowski[2], David Djurado[3], Petr Toman[4] , Jiri Pfleger[4], Małgorzata Zagórska[1] and Adam Proń[1]

[1]*Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, 00664 Warszawa, Poland,* renatarybakiewicz@gmail.com
[2]*Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, 01224 Warsaw, Poland*
[3]*INAC/SPrAM (UMR 5819, CEA-CNRS-Univ. J. Fourier-Grenoble 1) LEMOH, Grenoble, 38054 Grenoble Cedex 9, France*
[4]*Institute of Macromolecular Chemistry, 162 06 Prague 6, Czech Republic*

Conjugated molecules and macromolecules can be used as semiconductors in organic electronic devices, such as field effect transistors, photovoltaic cells or light emitting diodes.[1] Structural, redox and transport properties of organic semiconductors can be relatively easy modified by introducing electron donating or electron accepting moieties either as constituents of the main chain or in a form of side groups.[2,3] In this report we present a comparative study of donor–acceptor-donor type compounds, containing thiadiazole central ring with symmetrically attached two bithiophene groups (Fig. 1). They have been synthesized by Suzuki coupling between bis-2,5-(5-bromo-2-thienyl)-1,3,4-thiadiazole and neopentyl diester of appropriately alkyl substituted 2-thienylboronic acids. Electrochemical, spectroscopic and structural properties of the obtained compounds are dependent on the position and number of the solubilizing alkyl groups. Preliminary results indicate that efficient light emitting diodes can be fabricated from these materials

DONOR - ACCEPTOR - DONOR

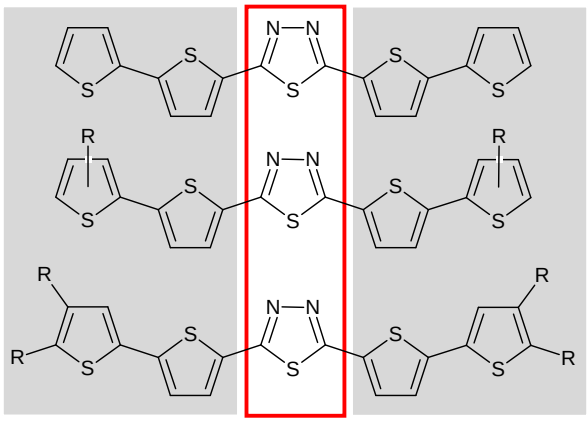


Fig. 1 Schematic structure of studied molecules (R = C_8H_{17}).

This work has been financially supported by the FP-7, NoE/ICT, FLEXNET Contract No 247745, 2010 – 2012 and the European Union in the framework of European Social Fund through the Warsaw University of Technology Development Programme, realized by Center for Advanced Studies.

[1] A. Pron, P. Gawrys, M. Zagorska, D. Djurado, R. Demadrille, *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 2577-2632.
[2] E. Kurach, D. Djurado, J. Rimarcik, A. Kornet, M. Wlostowski, V. Lukes, Jacques Pecaut, M. Zagorska, A. Pron, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2011**, 13, 2690–2700.
[3] [3] R. Rybakiewicz, J. Zapala, D. Djurado, R. Nowakowski, P. Toman, J. Pfleger, J.-M. Verilhac, M. Zagorska, A. Pron, *Phys. Chem. Chem. Phys*., **2013**, 15, 1578-1587.

3P07
VYUŽITIE POLYADIČNEJ REAKCIE 2-OXAZOLÍNOV NA PRÍPRAVU POLYMÉROV SO ŠPECIFICKÝMI TERMICKÝMI VLASTNOSŤAMI

Juraj Kronek[1], Jozef Lustoň[1], Angela Kleinová[1], Ivica Janigová[1], Jan Nedbal[2], Helena Valentová[2]

[1]*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbrvská cesta 9, 84541 Bratislava, juraj.kronek@savba.sk*
[2]*Matematicko-fzikálna fakulta, Univerzita Karlova, V Holešovičkách 2, Praha, Česká republika*

2-Oxazolíny predstavujú menej tradičnú skupinu heterocyklických zlúčenín, ktoré možno využiť na prípravu polymérov s rôznou štruktúrou a rôznymi vlastnosťami. Kým katiónová polymerizácia 2-oxazolínov poskytuje poly(N-acyletylénimíny) s bočnými substituentami, adičnú reakciu 2-oxazolínov s karboxylovými kyselinami, fenolmi a tiolmi možno využiť na prípravu poly(esteramidov), poly(éteramidov)

a poly(tioéteramidov) obsahujúcich substituenty v hlavnom reťazci [1]. Na výslednú štruktúru polymérov pripravených polyadíciou 2-oxazolínov má vplyv štruktúra použitých monomérov, ako aj typ polyadičnej reakcie. V prípade použitia 2-oxazolínovej jednotky a ďalšej funkčnej skupiny v jednej molekule hovoríme o polyadícii typu AB. Polyadícia typu AA+BB je využitá vtedy, ak sa použijú bis(2-oxazolíny) a napríklad dikarboxylové skupiny. Hypervetvené polyméry sa pripravia v prípade, ak sa využijú monoméry typu AB_2.

Polyméry obsahujúce naftalénovú jednotku boli pripravené polyadíciou 2-(6-hydroxynaftalén-2-yl)-2-oxazolínu reprezentujúceho monomér typu AB a polyadíciou 1,4-fenylén-bis(2-oxazolínu) s 2,6-, 2,5-, 1,6- a 1,8-dihydroxynaftalénmi (polyadícia typu AA+BB) [2]. Výsledné polyméry preukazovali zvýšenú termickú stabilitu. Polyméry obsahujúce bifenylovú jednotku v hlavnom reťazci sa pripravili podobným spôsobom, keď sa využili obidva typy polyadičnej reakcie (AB, AA+BB) [3]. Prítomná bifenylová jednotka predstavuje účinný mezogén a polyméry typu AA+BB vykazovali kvapalno-kryštalické vlastnosti. Prítomnosť mezofázy s nematickou textúrou sa potvrdila fotografiami z optického mikroskopu s polarizovaným svetlom a vyhrievanou platňou aj výsledkami z DSC.

Práca bola podporená projektom Grantovej agentúry SAV a MŠ VEGA s evidenčných číslom 2/0151/12 a projektom Agentúry pre výskum a vývoj APVV s evidenčným číslom APVV-0362-10.

[1] J. Kronek, J. Luston, F. Bohme, Chem. Listy, 92, 475 (1998)
[2] J. Kronek, J. Lustoň, A. Kleinová, I. Janigová, Polym. Adv. Technol., 23, 1057 (2012)
[3] J. Lustoň, J. Kronek, A. Kleinová, I. Janigová, H. Valentová, J. Nedbal, J. Polym. Sci. Polym. Chem. 50, 3936 (2012)

3P08
ŠTÚDIUM CYTOTOXICITY POLYMÉRNYCH MATERIÁLOV PRE VYUŽITIE V BIOMEDICÍNE

Zuzana Kroneková, Juraj Kronek, Gabriela Kolláriková, Vladislav Semak, Peter Kasák, Igor Lacík

Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, zuzana.kronekova@savba.sk

V súčasnosti majú polymérne materiály široké uplatnenie v biomedicíne ako súčasť implantátov, ako nosiče liečiv, ako materiál na enkapsuláciu buniek a proteínov a v tkanivovom inžinierstve. Základnym predpokladom týchto materiálov musí byť ich biokompatibilita, ktorá sa hodnotí v spojení s tkanivom alebo s účelom na ktoré sú tieto materiály určené [1]. Naším cieľom bolo zavedie *in vitro* metód s využitím bunkových línii, testovaním vzoriek v kompletnej krvi a iné, ktoré nám umožňujú hodnotenie cytotoxicity a immunotoxicity polymérnych materiálov.

Rôzne modifikácie mikrokapsúl tvorených na základe ionotrópneho gélovania alginátu sodného sa využívajú na enkapsuláciu buniek určených na transplantáciu do organizmu. Mikrokapsule musia poskytnúť bunkám vhodné prostredie na prežívanie, zabezpečiť prísun živín a kyslíka do kapsúl, difúziu metabolitov z kapsule a poskytnúť imunitnú ochranu pred hostiteľským organizmom [2]. Porovnávali sme cytotoxicitu mikrokapsúl, ktorých povrchová membrána bola upravená použitím rôznych princípov. Takouto modifikáciou sme získali zníženie odozvy imunitného systému. MTT test na viabilitu buniek preukázal miernu cytotoxicitu mikrokapsúl v závislosti od typu buniek.

Polyméry na báze 2-oxazolínov sú syntetické polyméry s veľkým potenciálom ako nosiče liekov, vakcín či DNA. Študované poly(2-oxazolíny) boli netoxické k fibroblastom a makrofágom, neovplyvňovali makrofágovú aktivitu a naopak preukazovali imunomodulatívnu aktivitu, ktorá je vhodná práve pri uplatnení týchto polymérov ako nosičov vakcín [3].

Táto práca bola podporená Agentúrou pre výskum a vývoj č. APVV-0486-10 a č. APVV-0302-10 a agentúrou SAV a MŠ č. VEGA 2/0151/12.

[1] D. F. Williams: On the mechanisms of biocompatibility, Biomaterials 2008, 29, 2941-2953.
[2] I. Lacik: Current status on immunoprotection of transplanted islets: focus on islet microencapsulation, Micro Nanosyst. 2013, 5, 000-000.
[3] J. Kronek, E. Paulovičová, L. Paulovičová, Z. Kroneková, J. Lustoň: Immunomodulatory efficiency of poly(2-oxazolines), J. Mater. Sci. Mater. Med. 2012, 23, 1457-1464

3P09
VĚTVENÍ SILNÝCH POLYELEKTROLYTŮ ZÍSKANÝCH KOPOLYMERIZACÍ VINYLOVÝCH A DIVINYLOVÝCH MONOMERŮ VE VODNÉM PROSTŘEDÍ. ^{1}H NMR ANALÝZA

Jiří Podešva[1], Jiří Spěváček[1], Pavel Kratochvíl[1], Miloš Netopilík[1]

[1]*Ústav makromolekulární chemie, v.v.i., Akademie věd České republiky, Heyrovského nám. 2, 16206 Praha 6, Česká republika, podesva@imc.cas.cz*

Statistické „long-chain“ větvení, ke kterému dochází během některých typů (ko)polymerizací, je složitý proces a úplná charakterizace jeho produktů je velmi obtížná [1, 2], protože větvené polymery jsou značně neuniformní v molární hmotnosti, počtu větvících bodů v makromolekule a architektuře jednotlivých makromolekul [3].

Metodami ^{1}H NMR a SEC jsme studovali větvení při radikálové kopolymerizaci 4-vinylbenzen-sulfonátu sodného (SSNa) a *N*,*N*'-methylen-bis(akrylamidu) (MBAA) ve vodném prostředí. ^{1}H NMR poskytla jednak stupeň konverze, jednak obsah tří typů monomerních jednotek v řetězci, tj. SSNa, MBAA s visícím vinylem a MBAA se zreagovaným visícím vinylem (větvicí centrum). Jelikož stupně konverze byly stanoveny pro vzorky surové směsi kopolymer/monomer přímo odebírané v určitých časových intervalech z polymerizujícího systému, bylo nutné jako polymerizační rozpouštědlo použít D_2O, aby byl potlačen signál vody, který brání interpretaci spekter. Část každého takto odebraného vzorku byla podrobena dialýze pro odstranění monomerů, získaný samotný kopolymer izolován lyofilizací, rozpuštěn v D_2O a znovu změřen ^{1}H NMR. Tím byl pro celý systém stanoven obsah jednotlivých monomerních jednotek, včetně větvících center. Kombinací SEC (molární hmotnosti) a ^{1}H NMR bylo zjištěno, že počet jednotlivých monomerních jednotek, připadající na 1000 jednotek v řetězci se měřitelně nemění se stupněm konverze a pouze mírně vzrůstá s rostoucím poměrem MBAA/SSNa v násadě.

Autoři děkují Grantové agentuře České republiky (projekt P205/11/J043) za finanční podporu a firmě Wyatt Technology Ltd za laskavé poskytnutí laserového fotometru DAWN.

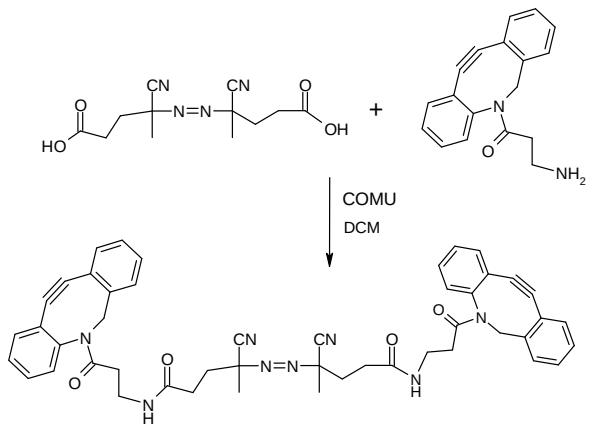
[1] P. Kratochvíl: Macromol. Symp. *152*, 279 (2000).
[2] B. I. Voit, A. Lederer: Chem. Rev. *109*, 5924 (2009).
[3] M. Netopilík, P. Kratochvíl: Polym. Int. *55*, 196 (2006).

3P10
COMBINATION OF CLICK CHEMISTRY AND CONTROLLED RADICAL POLYMERIZATION FOR SYNTHESIS OF ADVANCED POLYMER DRUG DELIVERY SYSTEMS

Michal Pechar[1], Robert Pola[1], Alena Braunová[1], Richard Laga[1], Karel Ulbrich[1]

[1]*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06, Prague 6, Czech Republic*

Covalent binding of low-molecular weight drugs to hydrophilic polymer carriers offers several advantages. It often improves pharmacokinetics of the drugs, prolongs their blood circulation and also enables attachment of eventual targeting ligands. We prepared several biologically active peptides and attached them to polymer drug carriers using various modifications of azide-alkyne cycloaddition - click chemistry. The major advantage of this method is the possibility of binding of even unprotected peptides to polymer drug carriers. First, we tried the most popular click chemistry using copper (I) as a catalyst in aqueous solution as well as in organic solvents. To attach peptides to a polymer carrier bearing a cytostatic drug doxorubicin, we used ruthenium complexes as catalysts. Later, we bound peptide azides to polymers using metal free click chemistry based on dibenzocyclooctyne (DBCO) reactive group. Finally, we synthesized semitelechelic polymers containing a single DBCO group at the end of the polymer chain using reversible addition−fragmentation chain transfer (RAFT) polymerization. We utilized the terminal DBCO group for preparation of well-defined diblock copolymers consisting of the peptide and the polymer block. We carefully monitored the binding reactions by HPLC and size-exclusion chromatography and thoroughly characterized the polymer conjugates using the same techniques.



Scheme 1. Synthesis of azoinitiator containing DBCO groups.

The authors gratefully acknowledge the support from Grant Agency of the Czech Republic (grant P207/12/J030).

3P11
ACETYLACETONATES OF VARIOUS METALS AS EFFICIENT CATALYSTS OF THE POLYMERIZATION OF L-LACTIDE INITIATED WITH MACRODIOLS

Anna Kundys, Andrzej Plichta, Anita Jóźwiak, Zbigniew Florjańczyk

Faculty of Chemistry, Warsaw University of Technology, Noakowskiego 3, 00-664 Warsaw, Poland, akundys@ch.pw.edu.pl

L-Lactide (LA) polymerizations initiated with poly(butylene adipate) (PBA) carried out in the presence of acetylacetonates (acac) of various metals [Zr, Zn, Fe(III), Mg, Ca and Li], were studied. The synthesis was performed in bulk at 190°C for 3hrs. It was found by means of GPC that the highest M_n of copolymers was achieved in the presence of $Zr(acac)_4$ (M_n=37.8 kg/mol), $Fe(acac)_3$ (M_n=33.5 kg/mol) and $Zn(acac)_2$ (M_n=30.2 kg/mol). The ^{1}H NMR and MALDI ToF analysis showed that the obtained products comprise the mixture of block copolymers as well as linear and cyclic lactic acid homopolymers. Moreover, it was proved that under the applied conditions almost all of initiator macromolecules took part in the polymerization. MALDI ToF showed that more copolymers were formed when using acac of Zr, Fe, Li comparing to other studied systems. In addition, ^{13}C NMR spectra revealed significant differences in the microstructure of the copolymers depending on the used catalyst, caused by the racemization processes at chiral centers of lactic acid monomeric units. In the case of using Zr, Zn and Fe acacs, the obtained copolymers contained almost exclusively L-lactic acid units, whereas in case of Ca, Mg and Li acacs, signals derived from D-lactic acid units were visible.

This work was partially carried out within the Innovative Economy project number POIG.01.01.02-10-025/09 "Technology of production of biodegradable polyesters from renewable resources" (acronym BIOPOL). The project was financially supported by European Union - European Regional Development Fund and the European Union in the framework of European Social Fund through the Warsaw University of Technology Development Program, realized by Center for Advanced Studies.

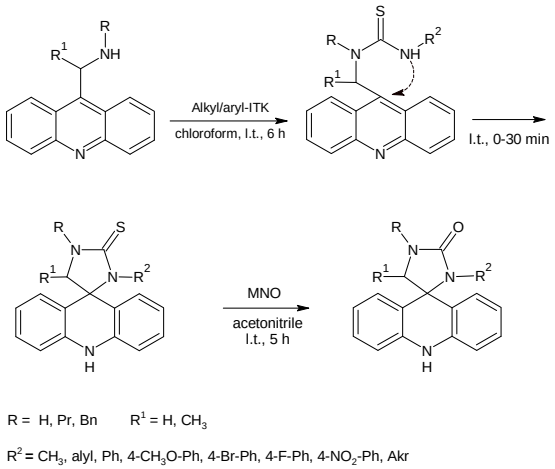
3P12
NOVÉ SPIROCYKLY NA BÁZE AKRIDIN-9-YLMETYLAMÍNU

Ján Imrich[1], Mária Vilková[1], Marianna Prokaiová[1]

[1]*Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Moyzesova 11, 040 01 Košice, jan.imrich@upjs.sk*

Ďalšou novou spirocyklizáciou akridínových prekurzorov zo série nami zistených v ostatných rokoch [1] sa ukázala byť spirocyklizácia 1-alkyl/aryl-3-(akridin-9-ylmetyl)tiomočovín získaných z titulného amínu a alkyl/arylizotiokyanátov (ITK), ktoré rýchlo spontánne cyklizovali na 1-alkyl/aryl-spiro[dihydroakridín-9'(10'*H*),5-imidazolidín]-2-tióny. Reakciou s mezitylnitriloxidom sme ich následne previedli na príslušné spiro[dihydroakridín-9'(10'*H*),5-imidazolidín]-2-óny, ktoré sa parciálne spätne otvárali na otvorené močovinové formy v rozsahu, ktorý závisel od typu substituentov pripojených na spiro kruh.

Aby sme objasnili dôvody spontánnej spirocyklizácie, modifikovali sme vstupný amín na (*N*-(akridin-9-ylmetyl)propán-1-amín, *N*-(akridin-9-ylmetyl)benzylamín a [1-(akridin-9-yl)etyl]propán-1-amín a získali s ITK ďalšie tri série oveľa reaktívnejších tiomočovín, ktoré sa už nedali pozorovať ani v NMR spektrách, a priamo cyklizovali na analogické spiro akridíny s Me, Pr a Bn substituentami na imidazolidínovom kruhu. Zároveň sme spektroskopicky včítane ^{15}N NMR analyzovali štruktúru 28 cieľových zlúčenín pomocou analýzy NMR spektier a substitučných efektov na chemické posuny.



R = H, Pr, Bn R^1 = H, CH_3

R^2 = CH_3, alyl, Ph, 4-CH_3O-Ph, 4-Br-Ph, 4-F-Ph, 4-NO_2-Ph, Akr

Poďakovanie. Grant VEGA 1/0672/11. Štátny program rozvoja infraštruktúry vedy a výskumu - NMR.

[1] Karel D. Klika, Juraj Bernát, Ján Imrich, Igor Chomča, Reijo Sillanpää, Kalevi Pihlaja: *J. Org. Chem*. *66*, 4416–4418 (2001)

3P13
SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ ÚČINNOSŤ TAKRIN-KUMARINOVÝCH ANALÓGOV AKO POTENCIÁLNYCH LIEČIV ALZHEIMEROVEJ CHOROBY.

Slávka Hamuľaková[1], Katarína Špilovská[2], Martina Hrabinová[2], Ladislav Janovec[1], Kamil Kuča[2,3], Ján Imrich[1]

[1]Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity P. J. Šafárika, 04167 Košice, Slovenská republika, slavka.hamulakova@upjs.sk
[2] Centrum pre pokročilé štúdia, Fakulta vojenského zdravotníctva Univerzity obrany, 500 01 Hradec Králové, Česká republika,
[3] Centrum pre biomedicínsky výskum, Fakultná nemocnica, 500 01 Hradec Králové, Česká republika

Alzheimerova choroba (AD) je progresívne neurodegeneratívne ochorenie, ktoré je charakterizované deficitom v cholinergnom systéme, hromadením beta-amyloidu (Aβ) a abnormálne fosforylovaného tau-proteínu [1]. Za kľúčovú skupinu liečiv Alzheimerovej choroby sú považované inhibítory acetylcholínesterázy aj napriek tomu, že sa objavujú stále nové trendy v terapii tohto ochorenia. Kumarinový skelet je súčasťou veľkého počtu prírodných zlúčenín, vykazujúcich široké spektrum biologickej účinnosti [2]. Významnou biologickou účinnosťou vyššie uvedených derivátov kumarínu je inhibičná aktivita zahrňujúca inhibíciu cholínesteráz (acetylcholínesterázy (AChE) a butyrylcholínesterázy (BChE)), monoaminooxidázy (MAO) a β-sekretázy (BACE). Cieľom našej práce bolo štúdium syntézy a vzťahu medzi štruktúrou a inhibičnou účinnosťou nových ligandov, ktoré boli pripravené kombináciou takrinu (9-amino-1,2,3,4-tetrahydroakridin) a kumarinového skeletu odvodeného od kyseliny (7-hydroxy-2-oxo-2*H*-4-chromenyl) octovej. Na stanovenie terapeutického potenciálu novej série takrin-kumarinových ligandov pre liečbu AD bola Ellmanovou metódou stanovená ich inhibičná aktivita voči ľudskej acetylcholínesteráze (*h*AChE) a ľudskej butyrylcholínesteráze (*h*BChE). Syntetizované deriváty vykazovali zaujímavú *in vitro* inhibičnú účinnosť s hodnotami IC_{50} v mikromolárnych koncentráciách.

Táto práca vznikla za finančnej podpory Slovenskej Grantovej Agentúry VEGA (granty 1/0672/11, 1/0179/11, 1/0001/13), štátneho programu NMR (grant č. 2003SP200280203) a Českej grantovej agentúry, grant P303/11/1907.

[1] Preet Anand, Baldev Singh: Arch. Pharm. Res. *36* (2011) 375-399.
[2] Preet Anand, Baldev Singh, Nirmal Singh: Bioorg. Med. Chem. *20* (2012) 1175-1180.

3P14
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA JASPÍNU B A JEHO ANALÓGOV

Eva Mezeiová, Miroslava Martinková, Dominika Jacková, Jozef Gonda

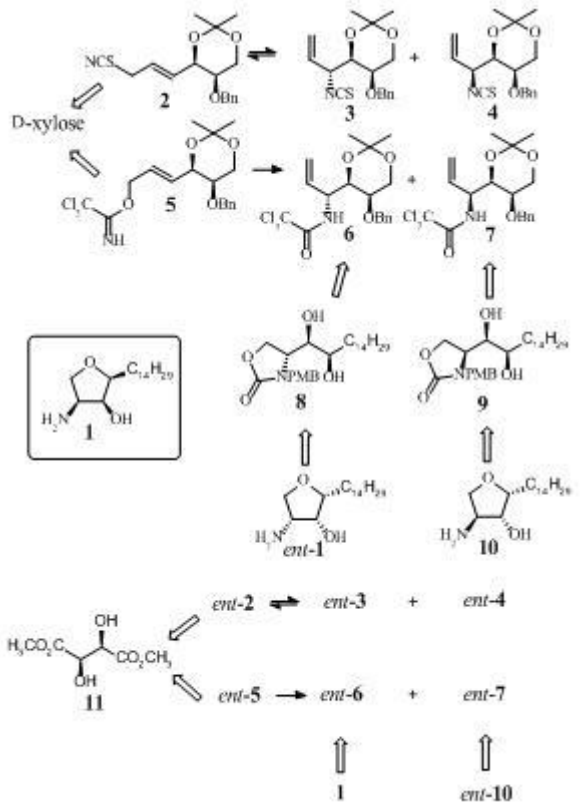
Univerzita P.J. Šafárika,Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie Moyzesova 11, 040 01 Košice, eva.mezeiova@student.upjs.com

Jaspín B (**1**) je prvým prírodným anhydrofytosfingozínom, ktorý bol izolovaný, a to dvoma nezávislými skupinami z morských hubiek rodu *Jaspis* a *Pachastrissa*, podľa ktorých bol aj pomenovaný [1]. Pre zaujímavú štruktúru a biologickú aktivitu sa jaspín B (**1**) a jeho analógy stali predmetom záujmu mnohých syntetických chemikov, o čom svedčí množstvo doteraz uskutočnených syntéz [2].

Ako východisková látka pri príprave enantioméru jaspínu B (*ent*-**1**) a jeho C(4)-epiméru **10** bola použitá D-xylóza, z ktorej bol pripravený tiokyanát **2** a trichlóacetimidát **5** ako substráty pre kľúčové kroky našej syntetickej stratégie, a to [3,3]-heterosigmatropné prešmyky, pomocou ktorých bolo do molekuly zabudované nové stereogénne centrum. Produkty prešmykov, zodpovedajúce izotiokyanáty **3**, **4** a trichlóracetamidy **6**, **7**, boli transformované na

dioly **8** a **9**. Ich konečnou modifikáciou budú syntetizované finálne molekuly *ent*-**1** a **10**.

Syntéza jaspínu B (**1**) a jeho C(4)-epiméru *ent*-**10** vychádzala z metylesteru kyseliny L-vínnej **11**, z ktorej boli pripravené tiokyanát *ent*-**2** a imidát *ent*-**5** a tie boli podrobené vyšie uvedeným prešmykom za vzniku izotiokyanátov *ent*-**3**, *ent*-**4** a amidov *ent*-**6**, *ent*-**7**. Ich modifikáciou bude pripravený jaspín B (**1)** a *ent*-**10**.



Obr. 1 Syntetický plán

Tento príspevok vznikol s podporou projektov VVGS 27/12-13, VEGA 1/0568/12 a VEGA 1/0433/11.

[1] (a) Kuroda, I.; Musman, M.; Ohtani, I. I.; Ichiba, T.; Tanaka, J.; Gravalos, D. G.; Higa, T. *J. Nat. Prod.* **2002**, *65*, 1505-1506; (b) Ledriot, V.; Debitus, C.; Lavaud, C.; Massoit, G. *Tetrahedron Lett.* **2003**, *44*, 225-228.

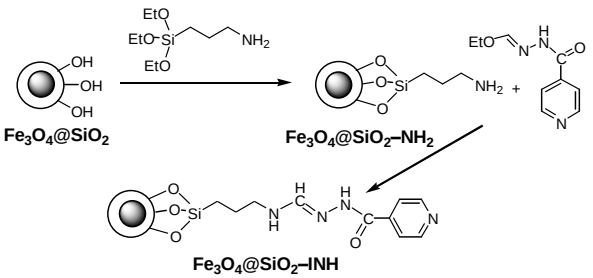
[2] (a) Yoshimitsu, Y.; Miyagaki, J.; Inuki, S.; Ohno, H.; Fujii, N. *Bioorg. Med. Chem.* **2011**, *19*, 5402-5408 a práce tam citované; (b) Abraham, E.; Davies, G. S.; Roberts, M. P.; Russell, A. J.; Thompson, E. J. *Tetrahedon* **2008**, *19*, 1027-1047 a práce tam citované.

3P15
SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE SMĚROVANÉHO KONJUGÁTU ISONIAZIDU S MAGNETICKÝMI NANOČÁSTICEMI

Miloš Sedlák,[1] Dattatry Bhosale[1], Jiří Palarčík[2], Aleš Imramovský[1]

[1]Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika
[2]Ústav enviromentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika

V současnosti představuje isoniazid (iso-nikotinoylhydrazid, INH) léčivo první volby používané v prevenci a v léčbě tuberkulózy [1]. Toto závažné infekční onemocnění je značnou zdravotní hrozbou pro lidstvo a postihuje až třetinu světové populace, nejvíce však pacienty se sníženou imunitou (např. HIV) [1]. Byl navržen, připraven a charakterizován konjugát INH s magnetickými nanočásticemi (115 ± 60 nm) mající „core-shell" strukturu (Fe_3O_4@SiO_2)[2]. Na povrch nanočástic Fe_3O_4@SiO_2 byly molekuly isoniazidu navázány prostřednictvím kovalentní pH senzitivní amidinové vazby (Obr.1).



Obr. 1 Příprava konjugátu Fe_3O_4@SiO_2-INH.

Konjugát Fe_3O_4@SiO_2-INH byl charakterizován, mikroanalýzou, IR, práškovou difrakcí, SEM a pomocí dynamického rozptylu světla. Uvolňování INH z nosiče bylo ověřeno pomocí HPLC, rychlost uvolňování byla studována za podmínek *in vitro* použitím UV-Vis. V roztoku $1 \cdot 10^{-2}$ mol·1^{-1} HCl při 37 °C dochází k uvolňování INH z nosiče s poločasem $t_{1/2}$ = 65 s a ve fosfátovém pufru při pH = 5,3 ($2 \cdot 10^{-2}$ mol·1^{-1}; 37 °C) s poločasem $t_{1/2}$ = 115 s. V roztoku fosfátového pufru při hodnotě pH = 7,4 ($2 \cdot 10^{-2}$ mol·1^{-1}; 37 °C) je konjugát stabilní tj. během 24 hodin se uvolnilo < 5%. Připravený konjugát INH s biokompatibilními magnetickými nanočásticemi Fe_3O_4@SiO_2 má vysoký aplikační

potenciál umožňující nasální nebo intravenózní aplikace s cíleným působením v zasažené tkáni aplikací externího magnetického pole [2].

Authors děkují za finační podporu Grantové agentůře ČR (Grant No. P106/11/0058).

[1] A. Imramovský, L. Grusová, L. Beneš, V. Pejchal, M. Sedlák, Bioorg. Med. Chem. Lett., 22 (2012) 5952.
[2] V.S. Arora Int. J. Nanomedicine, 7(2012) 3445.

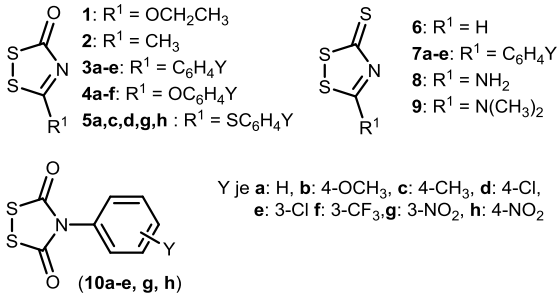
3P16
1,2,4-DITHIAZOLY JAKO ÚČINNÁ SULFURIZAČNÍ ČINIDLA P(III) SLOUČENIN

Jiří Hanusek[1], Oleksandr Ponomarov[1]

[1]*Univerzita Pardubice, Ústav organické chemie a technologie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR Jiri.Hanusek@upce.cz*

Na našem pracovišti byla testována sulfurizační aktivita celkem dvaceti pěti připravených 5-substituovaných-1,2,4-dithiazol-3-onů a 3-thionů (**1-9**) a sedmi 4-(subst.fenyl)-1,2,4-dithiazolidin-3,5-dionů (**10**) vůči trifenyl-fosfitu v acetonitrilu, dichlormethanu, tetrahydrofuranu a toluenu při 25 °C [1]. Bylo zjištěno, že všechny připravené 1,2,4-dithiazoly jsou mnohem lepší sulfurizační činidla než komerčně dostupné sloučeniny (tj. bis(fenylacetyl)disulfid, tetraethyl-thiuramdisulfid, *Beaucageovo* činidlo a síra). Ve všech rozpouštědlech se jako nejúčinnější ukázaly 5-fenoxy, 5-fenylthio a 5-ethoxy-1,2,4-dithiazol-3-on, jejichž reaktivita je nejméně stokrát vyšší než u ostatních 1,2,4-dithiazolů a o dalších několik řádů vyšší než u komerčně dostupných činidel. V rozporu s předchozími publikovanými výsledky [2] sulfurizace s 3-ethoxy-1,2,4-dithiazol-5-onem neposkytuje karbonylsulfid a ethyl-kyanát jako vedlejší produkt, avšak vzniká nestabilní ethoxythiokarbonylisokyanát, který byl zachycen reakcí s 4-methoxyanilinem. Podobné experimenty prokázaly, že místem ataku 1,2,4,-dithiazolového skeletu je u 5-fenoxy a 5-fenylthio derivátů atom síry vedle karbonylové skupiny. Reakční mechanismus zahrnuje rychlost určující atak atomu fosforu na atom síry, po kterém následuje rozklad vzniklého fosfoniového intermediátu na odpovídající thiofosfát a isokyanát resp. isothiokyanát. Z *Hammettovy* a *Brønstedovy* korelace bylo zjištěno, že struktura tranzitního stavu je téměř nepolární.

4-(Subst.fenyl)-1,2,4-dithiazolidin-3,5-diony, jsou mnohem méně účinnými sulfurizačními činidly. Studium mechanismu sulfurizace ukázalo, že u těchto derivátů je tranzitní stav reakce velmi polární a jeho struktura se blíží struktuře obojetného fosfoniového intermediátu.



Obr. 1

Autoři děkují MŠMT za institucionální podporu.

[1] O. Ponomarov, Z. Padělková, J. Hanusek: J. Phys. Org. Chem., (2013) v tisku.
[2] L. Chen, T. R. Thompson, R. P. Hammer, G. Barany: J. Org. Chem., (1996), 19, 6639-6645.

3P17
PYRIDINYL-IMIDAZOLIDINONY JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY HENRYHO REAKCE

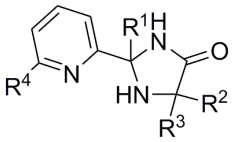
Pavel Drabina, Miloš Sedlák

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, pavel.drabina@upce.cz

Henryho reakce je jednou z klasických reakcí, při níž vzniká vazba C–C a je obvykle spojena se vznikem nového stereogenního centra. Poskytuje velmi cenné sloučeniny – β-nitroalkoholy – které mohou být dále transformovány na významné chirální meziprodukty využitelné například pro syntézu farmaceutických substancí. Asymetrická varianta této reakce, katalyzována vhodným enantioselektivním katalyzátorem, je velmi významným nástrojem, jak lze tyto sloučeniny získat v neracemické formě. Henryho reakce se rovněž stala vhodnou modelovou reakcí, pomocí níž je posuzována účinnost celé řady enantioselektivních katalyzátorů.

Mezi perspektivní enantioselektivní katalyzátory patří deriváty 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-onů, jejichž syntézou, charakterizací a studiem enantiokatalytických vlastností se zabývá tato práce. Byla připravena serie 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-onů v opticky čisté formě. Jednotlivé deriváty se navzájem lišily substitucí na imidazolidinonovém a pyridinovém cyklu a v absolutní konfiguraci na stereogenních

centrech (Obr. 1). Tyto sloučeniny byly použity jako chirální ligandy pro přípravu příslušných měďnatých komplexů. Enantiokatalytické vlastnosti měďnatých komplexů byly studovány při Henryho reakci alifatických i aromatických aldehydů s nitroalkany. Mnohé 2-(pyridin-2-yl)imidazolidin-4-ony byly vyhodnoceny jako vysoce enantioselektivní, neboť poskytovaly β-nitroalkoholy s optickou čistotou přes 90 % [1, 2]. Nejúčinnější deriváty byly aplikovány pro přípravu meziproduktů významných léčiv (Salmeterol, Amprenavir) [3]. Byla rovněž provedena imobilizace ligandů na polymerní nosič (kopolymer poly(ethylenglykol)-poly(L-glutamová kyselina)), a to za účelem recyklace katalyzátoru.



$R^1 = R^2 = H; CH_3$
$R^3 = CH(CH_3)_2; C(CH_3)_3; CH_2Ph$
$R^4 = H; CH_3; Ph$

Obr. 1

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR P106/11/0058 .

[1] Panov I., Drabina P., Padělková Z., Šimůnek P., Sedlák M.: *J. Org. Chem.* **2011**, *76*, 4787–4793.
[2] Drabina P., Karel S., Panov I., Sedlák M.: *Tetrahedron: Asymmetry* **2013**, *24*, 334–339.
[3] Panov I., Drabina P., Hanusek J., Sedlák M.: *Synlett* **2013**, *24*, 1280–1282.

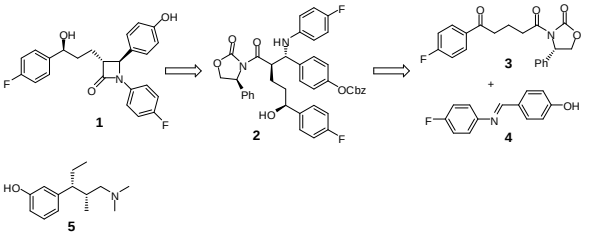
3P18
DEVELOPMENT OF GENERIC APIS: (-)-EZETIMIBE AND (-)-TAPENTADOL

Josef Hájíček

Zentiva, k.s., U Kabelovny 130, 102 37 Prague 10, Czech Republic, josef.hajicek@zentiva.cz

Development of synthesis of APIs at generic companies starts far before patent expiry. The philosophy behind such development will be discussed in general and illustrated with the particular case of cholesterol lowering drug (-)-ezetimibe (**1**) and a brand new non-opioid analgesic (-)-tapentadol (**5**).

Several generations of ezetimibe synthesis were developed starting from commercially available starting materials, i.e. (*S*)-3-[4-(4-fluorobenzoyl)-1-oxobutyl]-4-phenyloxazolidin-2-one (**3**) and *N*-(4-hydroxybenzy-lidene)-4-fluoroaniline (**4**). All variants of synthetic route feature diastereoselective addition of titanium(IV) enolates to C=N double bond and Corey-Bakshi-Shibata reduction of ketone carbonyl as the key steps. The last generation involves alcohol **2** with all three chiral centres in correct configuration as the key intermediate. It involves six steps with only four isolated crystalline intermediates and is amenable to large scale production.Vysokých Tatier.



De novo stereoselective synthesis of (-)-tapentadol (**5**) will be also presented which involves the Claisen rearrangement of metalated cinnamyl propionate as the key step.

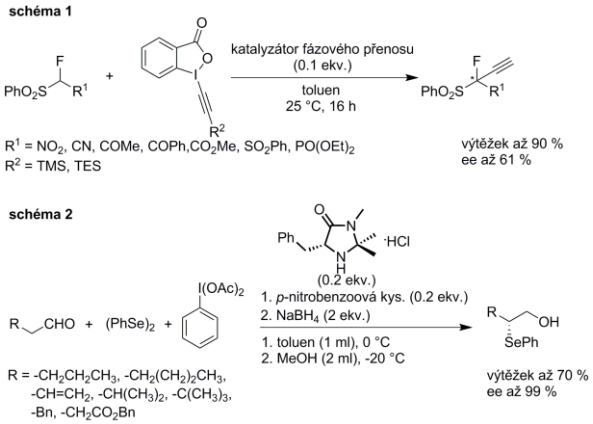
3P19
VYUŽITÍ SLOUČENIN HYPERVALENTNÍHO JÓDU V ASYMETRICKÉ ORGANICKÉ SYNTÉZE

Martin Kamlar[1], Jan Veselý[1]

[1] *Katedra organické chemie, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, Praha, 12843, kamlar.m@natur.cuni.cz*

Sloučeniny hypervalentního jódu jsou z hlediska organické syntézy zajímavou skupinou látek. Jejich nízká toxicita spolu s vysokou selektivitou a možností použití mírných reakčních podmínek umožnily v posledních letech vypracovat řadu alternativních a dnes již standartních metodik např. oxidace alkoholů na aldehydy pomocí Dess-Martinova činidla (DMP) či postupů tvorby C-C vazeb zahrnující alkylační, alkynylační nebo arylační reakce [1].

Vzhledem ke zkušenostem v oblasti organokata–lýzy jsme naši pozornost věnovali organokata–lytické elektrofilní alkynylaci fluorovaných derivátů (phenylsulfonyl)methanu pomocí sloučenin hypervalentního jódu (EBX) (**schéma 1**) [2]. V souvislosti s tím jsme vypracovali alternativní metodiku pro přípravu enantiomerně čistých α-selenylovaných aldehydů za využití enaminové katalýzy a sloučenin hypervalentního jódu (**schéma 2**) [3].



Podporováno grantem GA ČR (reg. č. P207/10/0428) a MSM0021620857.

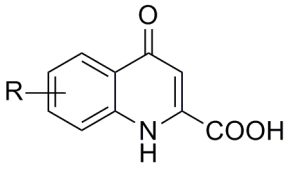
[1] Brand, J. P.; Charpentier, J.; Waser, J. *Angewandte Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 9346.
[2] Kamlar, M.; Putaj, P.; Veselý, J. *Tetrahedron Lett.* **2013**, *54*, 2097-2100.
[3] Kamlar, M.; Veselý, J. *Tetrahedron: Asymmetry*, **2013**, *24*, 254-259.

3P20
SYNTÉZA, VLASTNOSTI A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH KYNURÉNOVÝCH KYSELÍN

Kristína Plevová[1], Jana Jarčušková[2], Viktor Milata[1], Jela Mistríková[2, 3]

[1]Slovenská technická univerzita, Fakulta chemickej a potravinárske technológie, Oddelenie organickej chémie, Radlinského 9, 812 15 Bratislava, kristina.plevova@gmail.com
[2]Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra mikrobiológie a virológie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská Republika
[3]Slovenská akadémia vied, Virologický ústav, Dúbravská cesta 9, 845 05 Bratislava, Slovenská Republika

Kynurénová kyselina a jej deriváty [1, 2] fungujú ako endogénni antagonisti NMDA (*N*-metyl-*D*-aspartátových) receptorov. Samotná kynurénová kyselina je v literatúre často označovaná ako „*liečivo budúcnosti*“ nakoľko vykazuje významnú aktivitu pri blokácií glutámových receptorov. Keďže tieto deriváty fungujú aj ako neuroprotektory [3] sú tiež považované za potenciálne liečivá chorôb CNS (centrálnej nervovej sústavy) spôsobenej neurodegeneráciou neurónov (napr. *Alzhaimerova choroba*, *Parkinsonova choroba*, *schizofrénia*, *Huntingtonova choroba*). Našou snahou bolo preto pripraviť nové typy kynurénových kyselín (Obr. 1), ktoré by vykazovali omnoho vyššiu biologickú aktivitu ako predchádzajúce známe deriváty.



R = 3-F; 3,4-F; 3,5-F

Obr. 1 Kynurénová kyselina

Pripravené deriváty boli testované tiež na poteciálnu antivírusovú aktivitu prostredníctvom využitia myšacieho gammaherpesvírusu (MuHV-4) v podmienkach *in vitro*.

Táto práca bola finančne podporovaná Grantovou agentúrou (VEGA 1/0660/11, VEGA 1/1340/12, VEGA 1/0185/11) a Agentúrou na podporu výskumu a vývoja (APVV-0339-10, APVV-0038-11).

[1] Nagy, K.; Plangár, I.; Gellért, L.; Varga, D.; Demeter, I.; Farkas, T.; Kis, Zs.; Marosi, M.; Zádori, D.; Klivényi, P.; Fülöp, F.; Szatmári, I.; Vécsei, L.; Toldi, J. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **2011**.
[2] Moroni, F.; Fossati, S.; Chiarugi, A.; Cozzi, A. *International Congress Series 1304*, **2007**, 305.
[3] Stone, T.W. *Pharmacol. Rev.* **1993**, 45, 309.

3P21
CERITÉ KATIONTY JAKO ÚČINNÝ KATALYZÁTOR SYNTÉZ ZA ÚČASTI SLOUČENIN S KARBONYLOVOU A OBDOBNOU FUNKČNÍ SKUPINOU [1]

Pavel Pazdera[1], Eva Havránková[1], Dana Němečková[1]

[1]Centrum pro syntézy za udržitelných podmínek a jejich management, Ústav chemie, PřF Masarykovy univerzity, Brno, Česká republika, pazdera@chemi.muni.cz

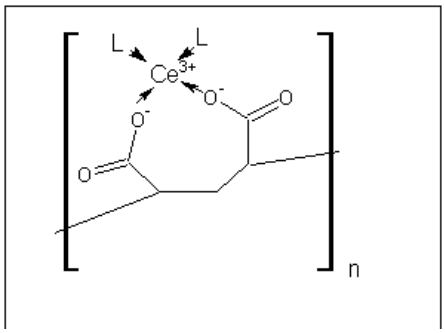
Reakce sloučenin s (funkcionalizovanou) karbonylovou skupinou tvoří jednu ze širokých oblastí organické chemie - např. [2]. Je všeobecně známo, že uvedené sloučeniny reagují zpravidla buď za bazické katalýzy, nebo reakce mohou být vyvolány přítomností protické, příp. Lewisovské kyseliny, většinou elektronově deficitní sloučeninou bóru, hliníku, zinku a pod. Jejich nevýhodou je vysoká tvrdost při reakci z důvodu nízké polarizovatelnosti, nemají k dispozici vakantní d-orbitaly o vhodné energii, a malá selektivita.

Kovy, které mají d-orbitaly a mohou je uplatnit při interakci s reagenty, jsou podstatně efektivnějšími selektivnějšími katalyzátory. Jako důležitá se ukazuje σ-interakce karbonylové skupiny nevazebným p-orbitalem kyslíku

s vakantním d-orbitalem kovu symetrie t_{2g} a současná zpětná π -donace z d-orbitalu kovu symetrie e_g do π* orbitalu karbonylu. Při tom dochází jednak k aktivaci karbonylového atomu uhlíku pro interakci s nukleofilem a dále k nárůstu kyselosti α-vodíkových atomů vedle karbonylu.

Právě Ce^{3+} se ukazuje jako potenciální efektivní katalyzátor pro reakce, kterých se účastní sloučeniny s karbonylovou skupinou. První příklad syntézy využívající $CeCl_3.7H_2O$ dopovaného NaI byl publikován pro Michaelovu adici 1,3-dikarbonylových sloučenin s enony v roce 1999 [3]. V následujících letech bylo publikováno dalších přibližně 20 prací.

V příspěvku budou demonstrovány příklady aplikací kationtů Ce^{3+}, případně s výhodou imobilizovaných na slabě kyselém katexu.



Obr. 1. Koordinace kationtu Ce^{3+} se slabě kyselým akrylátovým katexem

[1] Výsledky byly získány díky finanční podpoře České republiky, Národní politika výzkumu II, Trvalá prosperita, projekt č. 2A-1TP1/090, poskytovatel dotace Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR, a Technologické agentury ČR, projekt č. TA02010144.
[2] Methoden der Organischen Chemie (Houben-Weyl), 4th Ed. Vol. VII/2a-2c, Suplement. E3, E5, E14, Thieme Chemistry, 1952-2002.
[3] G. Bartoli, M. Bosco, M. C. Belluci, E. Marcantoni, L. Sambri, E. Torregiani: *Eur. J. Org. Chem.* 1999 (3) 617-620.

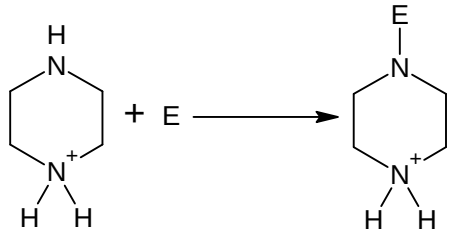
3P22
PŘÍMÁ *N*[1]-MONOSUBSTITUCE NA PIPERAZINU

Dana Němečková[1], Pavel Pazdera[1]

[1] Ústav chemie, PřF Masarykovy univerzity, Kamenice 753/5, 625 00 Brno, Česká republika, 80084@mail.muni.cz; pazdera@chemi.muni.cz

Piperazinový strukturní motiv se vyskytuje zejména v řadě léčiv a fytoefektorů. Zabudování takového strukturního motivu do molekuly se zpravidla odehrává s využitím *N*-mono–substituovaného piperazinu. Příprava těchto piperazinových derivátů je komplikována vznikem symetrických *N*,*N*´-disubstituovaných piperazinů. Z tohoto důvodu, se pro přípravu *N*-monosubstituovaných piperazinových derivátů využívá syntetický proces, při kterém je jeden dusíkový atom ochráněn (zejm. Boc, alkoxykarbonyl[1], acyl[2], benzyl[3]), na druhý N atom je pak navázán požadovaný substituent a následně se provede odchránění. Již zavedení chránící skupiny zpravidla nedává uspokojivé výtěžky. Z tohoto důvodu jsou *N*-monosubstituované piperaziny velice drahými stavebními bloky, případně nejsou v portfoliu chemických prodejců zařazovány vůbec. Například hydrochlorid 3-piperazin-1-ylpropannitrilu se prodává za 30 – 100 USD/mg a 4-(methoxykarbonyl)piperazin-1-ium chlorid za 208 USD/g.

Proto jsme se rozhodli pokusit se připravit různé (alkylované, acylované, apod.) deriváty piperazinu přímou metodou. Základem naší metody je využití piperazin-1-ium kationtu (Obr. 1). Jelikož protonace piperazinu snižuje reaktivitu druhého dusíkového atomu, rozhodli jsme se aktivovat elektrofilní reagenty kovy a jejich komplexy imobilizovanými na slabě kyselých katexech.



(E = -COR, -COOR, -$CONR_2$, -C=C→Y, -C≡C→Y)

Obr. 1: Obecné schéma reakce piperazi-1-ium kationtu s elektrofilním reagentem

Výsledky byly získány díky finanční podpoře České republiky, Národní politika výzkumu II, Trvalá prosperita, projekt č. 2A-1TP1/090, poskytovatel dotace Ministerstvo průmyslu a obchodu ČR.

[1] Stewart, H. W., Turner, R. J., Denton, J. J., Kushner, S., Brancone, L. M., McEwen, W. L., Hewitt, R. I., Subbarow, Y.: Journal of Organic Chemistry, 1948, 13, 134.
[2] Baitzly, R., Lorz, E. (Burroughs Wellcome Co.): US2436685 (1948).
[3] Org. Synth. 1973, Coll. Vol. 5, 88.

3P23
RASTLINNÉ A ŽIVOČÍŠNÉ TOXÍNY OKOLO NÁS.

Miroslav Kríž

Tau-Chem, Nobelova 34, PO BOX 29, 83605 Bratislava, kriz@tau.chem.sk

Mojej Fafinke na pamiatku.

I Boh riekol.“ Nech sú rastliny i zvieratá“. A boli. Nuž, tak nejako to mohlo začať. Dnes máme okolo seba milióny druhov rastlín, zvierat i nižších foriem života. Jedno však majú všetci spoločné. Okrem primárného metabolizmu, ktorý je nutný pre ich život, majú aj sekundárny metabolizmus, ktorého produktom sú príslušné metabolity. Tieto majú svoje vlastnosti nie len chemické, ale v značnej miere aj fyziologické. V tejto prednáške sa zoznámime s niektorými zástupcami alkaloidov, glykozidov a s ďalšími zaujímavými zlúčeninami z prírody, ktoré majú významné fyziologické vlastnosti. Mnohé sú jedy, iné zas v rozumných koncentráciách sú liečivami. Pohľad na výskyt, vlastnosti, štruktúru a i syntézu nám priblíži z tejto strany nepoznaný svet okolo nás.

3P24
NANOMECHANICKÉ VLASTNOSTI EXTRUDOVANEJ PLA FÓLIE POVRCHOVO MODIFIKOVANEJ VZDUŠNOU A ARGÓNOVOU PLAZMOU

M. Valentin [1], A. Skarmoutsou [2], M. Omastová [1], C.A. Charitidis [2], I. Krupa [1]

[1] Ústav polymérov, SAV, Dúbravská cesta 9, 842 36 Bratislava, Slovensko
[2] School of Chemical Engineering, National Technical University of Athens, 9 Heroon Polytechniou St., Zographos, 157 80 Athens, Greece

V tejto práci boli použité PLA extrudované fólie, ktoré boli modifikované vo vzdušnej, resp. argónovej plazme. Nemodifikované a modifikované PLA fólie boli analyzované nanoindentorom Hysitron 750 Ubi1® (nano–mechanické testovacie zariadenie) a vyhodnotil sa vplyv modifikácie. Ukázalo sa, že plazmová úprava vo vzdušnej atmosfére má vplyv približne do hĺbky 150 nm a celková drsnosť povrchu sa zvýšila o cca 50 nm. Modifikácia v argónovej plazme mala za následok zvýšenie drsnosti cca o 70 nm, ale nanomechanické vlastnosti boli rozdielne v porovnaní s modifikáciou vo vzdušnej atmosfére. Po modifikácii vo vzdušnej plazme sa zvýšila tvrdosť na hodnotu cca 300 MPa, na rozdiel od argónovej, kedy sa tvrdosť výrazne nezmenila a ostala na hodnote cca 200 MPa, ako pri nemodifikovanej fólii. Tiež bolo zistené, že pri vzdušnej plazme sa nezmenila hodnota redukovaného modulu pružnosti (E_r) a jej hodnota bola, ako pri nemodifikovanej fólii (~2 GPa). V prípade argónovej plazmy sa hodnota E_r znížila na hodnotu cca 1,4 GPa, čo by mohlo indikovať zmeny v chemickom zložení, resp. štruktúre. Je známe, že inertné plyny generujú voľné radikály, čo má za následok roztrhnutie väzieb C-C alebo C-H. Pozorované zníženie hodnoty E_r znamená zmenu elastických vlastností, spôsobenú degradáciou PLA [1].

This work was financially supported by the Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of the Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences (project No. 2/0064/10).

[1] A. Bismarck and J. Springer, ‘‘Wettability of Materials: Plasma Treatment Effects,’’ in Encyclopedia of Surface and Colloid Science, P. Somasundaran, Ed., Taylor & Francis, New York, 6592 (2006).

3P25
THE REINFORCING EFFECT OF ALTERATIVE FILLER IN RUBBER COMPOUNDS

Slavomíra Domčeková[1], Darina Ondrušová[1], Lenka Špániková[1], Zuzana Jankurová[1]

1 University of Alexander Dubček in Trenčín, Faculty of Industrial Technologies in Púchov, I.Krasku 491/30, 020 01 Púchov, slavomira.domcekova@gmail.com.

There is a distinction between fillers, which have much and little interaction: active or reinforcing fillers and non-active or non-reinforcing fillers [1].

Physico-mechanical properties and dynamic properties of compounds were measured to determine the reinforcing effect of alternative filler - dust from glass production in combination with carbon black in the rubber matrix.

The tensile strength, tensile elongation and hardness were evaluated from the aspect of physico-mechanical properties according to the determined norm [2,3].

The most attention was paid to the dynamic properties, which were measured on the device the Rubber Process Analyzer. This device was applied for measurement of Payne effect which is used for evaluating the interaction of

filler/polymer or filler/filler and expresses the measure of stability standing for destruction of the filler net with increasing deformation.

This work has been supported by VEGA No.1/0530/11and KEGA No.007 TnUAD - 4/ 2013.

[1] Wilma Dierkes: Raw materials and compounds in rubber industry, (2007)
[2] STN 62 1436 (ISO 37)
[3] STN 62 1433

3P26
SYNTHETIC POLYMER ADJUVANTS AS NOVEL IMMUNOSTIMULANTS FOR VACCINATION PURPOSES

Richard Laga[1,2], Geoffrey M. Lynn[1], Petr Chytil[2], Gray Kueberuwa[1], Anna Lagová[1], Michal Pechar[2], Robert Pola[2], Tomáš Etrych[2] and Len W. Seymour[1]

[1]University of Oxford, Department of Oncology, Old Road Campus Research Building, Roosevelt Drive, Oxford, OX4 7DQ, United Kingdom
[2]Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06, Prague 6, Czech Republic

Toll-like receptors (TLRs), widely exposed on extracellular or cytoplasmatic membranes of antigen presenting cells (APCs), play an important role in the protection of an organism to bacterial and viral infection. Those receptors are able to recognise certain conserved repeating structural motifs on the surface of pathogens; upon the interaction, TLR signaling activates the APCs resulting in production of cytokines, increased expression of co-stimulatory molecules and enhanced capacity to present pathogen. Therefore, TLR agonists are very potent adjuvants increasing the response to a vaccine. Free TLR agonists are, however, relatively toxic substances poorly mimicking the essential pattern component of the larger natural pathogens. We showed that conjugation of small synthetic TLR agonists to the hydrophilic polymer carriers is an elegant solution resulting in reduced adjuvant toxicity, improved material solubility and increased receptor avidity. In this work, we focused on intracellular TLRs 7/8 recognising single stranded RNAs as their natural ligand as well as small synthetic molecules based on imidazoquinolines (IQs) and nucleoside analogs. Synthetic IQ derivatives were attached to the multivalent poly[*N*-(2-hydroxypropyl)methacrylamide] (PHPMA)-based polymer carriers with different chain architecture using the click chemistry. In addition, mannose dendrons-based targeting moieties were introduced to the structures of polymer-TLR 7/8 ligand conjugates to increase their affinity to the APCs. Immune stimulatory effects of the resulting conjugates were evaluated in terms of their ability to induce release of the cytokines *via* activation of TLR 7/8 through NF-κB signaling pathway.

Financial support for this work is gratefully acknowledged from the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (grant No. EE2.3.30.0029).

3P27
ANTIBACTERIAL POLYETHYLENE PREPARED BY PLASMA TREATMENT

Igor Novák[1], Anton Popelka[1], Ivan Chodák[1], Milena Špírková[2], Angela Kleinová[1], Vladimír Vanko[3]

[1]Ústav polymérov SAV, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava 45, Slovakia, upolnovi@savba.sk
[2] ÚMCH AV ČR, Heyrovského nám. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic, spirkova@imc.cas.cz
[3] VIPO, a.s., Gen. Svobodu 1069/4, 958 01 Partizánske, Slovakia, vvanko@stonline.sk

Polyethylene (PE) belongs among the most used polymers in many industrial applications [1-3].The surface treatment is being increasingly used modification methods based on the plasma effect, which is environmentally friendly, clean and dry process. The multistep physicochemical approach was shown to be effective for binding the polysaccharides, namely chitosan and chitosan/pectin multilayer on the LDPE surface. The uniform layer and high surface power density of plasma can be generated by diffuse coplanar surface barrier discharge (DCSBD) plasma generator. On plasma treated surface polyacrylic acid (PAA) can be easily grafted that can to create an effective interfacial layer for antibacterial immobilization. The PAA brushes can be used as an interfacial layer that may bind antibacterial agents by effective way[5]. The polysaccharides excel appropriate properties for antibacterial immobilization. Polysaccharide based on chitosan is representing significant compound that can be immobilized on pre-treated PE surface via plasma and PAA grafting. PAA brushes synthesized via plasma-initiated graft polymerization of AA led to the increase of the wettability representing a stable base for the polysaccharides binding. The most effective bacterial inhibition zone was observed for LDPE coated by chitosan. Chitosan/pectin coated LDPE sample showed minor antibacterial activity only against *S. aureus*.

Acknowledgements. Authors are grateful to financial supports by the Ministry of Education of the Slovak Republic project No. 26220220091 by Research & Development Operational Program funded by ERDF, as well as the project „Application of Knowledge-based Methods in Designing Manufacturing Systems and Materials“ the project No. MESRSSR 3933/2010-11,and project of the Slovak Academy of Sciences (Grant VEGA 2/0185/10).

[1] R. Sanchis, O. Fenollar, D. García, L. Sánchez, R. Balart, Inter. J. Adhesion and Adhesives 28 (2008) 445.
[2] M. Z. Elsabee, E. S. Abdou, K. S. A. Nagy, M. Eweis, Carbohydr. Polym. 71 (2008) 187.
[3] K. Bazaka, M. V. Jacob, R. J. Crawford, E. P. Ivanova, Acta Biomater. 7 (2011) 2015.

3P28
DYNAMICKÉ VLASTNOSTÍ POLYELEKTROLYTŮ V ZÁVISLOSTI NA DIELEKTRICKÉ KONSTANTĚ ROZPOUŠTĚDLA A VELIKOSTI PROTIIONTU

Petr Štěpánek[a], Sergey K. Filippov[a], Thomas A.P. Seery[b], Peter Černoch[a], Martin Hrubý[a], Jaroslav Kříž[a], Jiří Pánek[a]

[a] *Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha, Česká republika, stepanek@imc.cas.cz*
[b] *Department of Chemistry, University of Connecticut, Storrs, Connecticut 06269, U.S.A.*

Konformace polyelektrolytového řetězce v roztoku závisí na stínění elektrostatických nábojů a na Bjerrumově délce (vzdálenost mezi náboji na řetězci, když elektrostatická energie mezi nimi je rovna *kT*). Tato je nepřímo úměrná teplotě a dielektrické konstantě rozpoučtědla ε. Některá rozpouštědla vykazují velký nárůst ε s klesající teplotou, což vede k velkým změnám Bjerrumovy délky. Vlastnosti polyelektro–lytových roztoků rovněž silně závisí na druhu a velikosti protiiontu.

Pomocí dynamického rozptylu světla a pulsního gradientového NMR (PFG-NMR) jsme experimentálně proměřili dynamické vlastnosti roztoků polystyrensulfonátu v různých rozpouštědlech až do teploty -80^{o}C. Například dielektrická konstanta N-methylformamidu má hodnoty ε=160 při 25^{o}C a ε=350 při -60^{o}C. Ukázali jsme, že ε má očekávaný vliv na dynamiku polyelektrolytu, neboť podíl difuzních koeficientů pomalého a rychlého módu klesá s klesající teplotou, tedy s rostoucím ε. Efekt dosažený změnou teploty je však podstatně slabší, nežli pro změnu iontové síly.

Vliv velikosti protiiontu jsme prozkoumali pro protiionty sodíku, rubidia, cesia a protiionty P1, P2, P4, kde P je fosfazen. S rostoucí velikostí protiiontu klesá difuzní koeficient rychlého kooperativního módu a roste difuzní koeficient pomalého doménového módu, což souvisí se změnou způsobu tvorby domén. Nicméně téměř plné natažená konformace polyelektrolytového řetězce zůstává nezměněna, jak plyne z měření PFG-NMR.

Práce byla vytvořena za podpory Grantové agentury ČR (202/09/2078) a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy (ME09059).

PREDNÁŠKY - SEKCIA 4: VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4P01
KVALITNÝ A INOVATÍVNY UČITEĽ V ŠKOLE DNEŠKA A BUDÚCNOSTI

Mgr. Katarína Javorová, PhD., doc. RNDr.Beáta Brestenská, PhD.[1], Mgr. Martin Šponiar[1]

[1]Prírodovedecká fakulta UK, Katedra didaktiky prírodných vied, psychológie a pedagogiky, Mlynská dolina, 842 15, javorovakatarina@gmail.com, brestenska@fns.uniba.sk, sponiar@fns.sk

Prírodovedné predmety ako chémia, fyzika, biológia, matematika, geografia sa na základných a stredných školách netešia veľkej obľube a žiaci, či študenti ich radia medzi náročnejšie a nevyberajú si ich pre svoje ďalšie štúdium (1) (2) (3). Najväčším problémom pre experimentálne vedy je ústup od experimentu na ZŠ a SŠ a zníženie počtu hodín výučby prírodovedných predmetov, ako aj chýbajúce prírodovedné laboratória, dostupnosť kvalitných učebníc na školách. Dnes na Slovensku máme 7 Univerzít kde pripravujú budúcich učiteľov prírodovedných predmetov na Bc. a Mgr. stupni štúdia. Prírodovedecká fakulta UK v Bratislave pripravuje 73 rokov budúcich učiteľov prírodných vied do škôl. Náš príspevok je postavený na otázkach, cez ktoré analyzujeme súčasnosť a pozeráme sa na budúcnosť prípravy kvalitných a inovatívnych učiteľov prírodovedných predmetov.

Práca vznikla s podporou grantu MŠVVaŠ SR, VEGA 1/0417/12.

[1] Veselský, M. Prírodovedné predmety v základnej škole očami stredoškolákov. *Pedagogická revue.* 1998, roč. 50., 3/4, s. 127-133.

[2] Veselský, M. Záujem žiakov o prírodovedné učebné predmety na základnej škole a hodnotenie ich dôležitosti – z pohľadu žiakov 1. ročníka gymnázia. *Psychologica – Zborník Filozofickej fakulty UK.* 1999, roč. 37., s. 79-86.

[3] Veselský, M. Hrubišková, H. Zájem žáku o učební předmět chemie. *Pedagogická orientace.* 2009, roč. 19., č. 3, s. 45-64.

4P02
JAK ZVÝŠIT ZÁJEM STUDENTŮ STŘEDNÍCH ŠKOL O STUDIUM PŘÍRODOVĚDNÝCH OBORŮ?

Ludmila Zajoncová

Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc-Holice, ludmila.zajoncova@upol.cz

V posledních 20 letech se v zemích Evropské unie projevuje nezájem o studium přírodo–vědných a technických oborů. Řada studentů dává přednost studiu humanitních či právních oborů i když by se mohli daleko lépe uplatnit v přírodních vědách.

Popularizací přírodních věd se zabývá projekt Přírodní vědy v 21. století, který motivuje studenty středních škol formou praktických cvičení a exkurzí na PřF UP Olomouc a třemi vybranými soutěžemi. Kontakt s pedagogy středních škol byl navázán prostřednictvím populárně naučných přednášek z oborů chemie a biologie. Pro studenty, které baví přírodní vědy a neví, co by mohli studovat, byla vytvořena Databáze přírodovědných předmětů, které lze studovat na VŠ v ČR. Tato Databáze obsahuje informace o studiu více než 900 různých oborů. V rámci projektu byly vytvořeny 3 typy soutěží, a to soutěž školních kolektivů Věda je zábava, soutěže mladých výzkumníků Badatel a internetová soutěž Labyrint. Všechny soutěže byly zakončeny na Studentské konferenci mladých přírodovědců v květnu 2013. Projekt v září končí, ale řada aktivit tohoto projektu bude pokračovat na webových stránkách www.priroda21.upol.cz i v následujících letech.

Tato práce vznikla za podpory grantu: OPVK Vzdělávání středoškolských pedagogů a studentů středních škol jako nástroj ke zvyšování kvality výuky přírodovědných předmětů CZ.1.07/1.1.00/14.0016.

4P03
POPULARIZÁCIA CHÉMIE NA GYMNÁZIU PAVLA HOROVA V MICHALOVCIACH

Beáta Semková

Gymnázium Pavla Horova, Masarykova 1, 071 01 Michalovce, beasemkova@gmail.com

„Deň vody“ a „Veda na ulici“ sú úspešné projekty, pomocou ktorých na Gymnáziu Pavla Horova v Michalovciach presviedčame študentov, že chémia, ale aj ostatné prírodovedné predmety

ktoré sú v škole väčšinou postrachom, môžu byť hravé a zaujímavé a potrebné pre život a prax.

Prvý z nich „Deň vody“ má 5 ročnú tradíciu a je organizovaný každoročne pri príležitosti Svetového dňa vody. V chemickom laboratóriu školy naši študenti ponúkajú možnosť otestovať si kvalitu vody z vlastných studní a vodovodov. Pomocou školského meracieho systému Vernier sledujú prítomnosť chloridov, dusičnanov, amónnych solí a celkovú tvrdosť vody. Využívajú to najmä naši študenti a ich rodičia, učitelia ale aj široká verejnosť. Za tie roky sa vytvorila celkom slušná databáza výsledkov našich meraní.

Druhý projekt sme nazvali „Veda na ulici“. V rámci neho sa žiaci gymnázia pomocou experimentov oboznamovali so zákonitosťami prírody a hravou formou ich prezentovali na verejnosti. Bola to zaujímavá vedecká šou alebo výstava plná zaujímavých a nielen chemických experimentov, vedeckých hračiek, najnovších poznatkov vedy a techniky, ktoré boli prezentované žiakmi priamo „na ulici“ – v centre na námestí v Michalovciach.

4P04
AKTIVITY NA GYMNÁZIU VILIAMA PAULINYHO TÓTHA V MARTINE V OBLASTI CHÉMIE

Jana Tavelová

4P05
BUDÚCNOSŤ CHEMICKEJ OLYMPIÁDY NA SLOVENSKU

Juraj Malinčík

Nábrežie Sv. Cyrila 329/40, 97101 Prievidza, malincik.juraj@gmail.com

Chemická olympiáda má na Slovensku dlhú tradíciu. Potvrdzuje to aj nadchádzajúci jubilejný 50. ročník súťaže. Súťaž pokračuje aj na medzinárodnej úrovni, kde Slovensko každoročne získava medaily, to sa však môže zmeniť, nakoľko chémia ide stále dopredu a rovnako sa aj úroveň MCHO z roka na rok zvyšuje. Úroveň našej olympiády by sa tiež mala zvyšovať, ak chceme držať krok so štátmi Ázie a bývalého Sovietského zväzu. Nedávni účastníci MCHO majú preto najväčšie šance posunúť CHO na Slovensku na podobnú úroveň ako je v zahraničí. Práve oni sú schopní dať študentom cenné skúsenosti a rady. Nemali by sme sa báť zmien a hlavne pustiť k tomu mladých ľudí, ktorí o to majú záujem. Na Slovensku je takých ľudí dosť, len im treba dať možnosť to ukázať.

Ja sám mám čerstvé skúsenosti s MCHO a záujem pomôcť. Prešiel som si všetkými kategóriami súťaže aj letnými školami a teda môžem povedať, čo bolo pre mňa dobré a čo zlé. Hlavný problém je samotné vyučovanie prírodovedných predmetov na základnej a strednej škole, kde štát hádže učiteľom polená pod nohy. Študentov musia učiť omnoho menej ako sú schopní pochopiť. Potom sa nie je čomu čudovať že talentovaní žiaci získavajú väčšinu svojich vedomostí samoštúdiom.

4P06
CHÉMIA PRE CHEMIKOV VERZUS CHÉMIA PRE NECHEMIKOV? MÔŽE BYŤ OBSAH PREDMETU CHÉMIA ROZDIELNY NA RÔZNYCH STREDNÝCH ŠKOLÁCH?

Ján Reguli

Katedra chémie, Pedagogická fakulta Trnavskej univerzity v Trnave, 918 43 Trnava, jreguli@truni.sk

Dlhodobý problém s neobľúbenosťou chémie a nízkou chemickou gramotnosťou obyvateľstva vedie aj k zamysleniu sa nad cieľmi a náplňou predmetu chémia na základných a stredných školách. Cieľom žiadneho predmetu nemôže byť získať a pripravovať všetkých žiakov pre ďalšie štúdium daného odboru (a následný výber povolania v tejto oblasti). Dôležitejšie je vychovať zo všetkých žiakov občanov s rozumným vzťahom k chémii. Obsah predmetu chémia by sa mal zmeniť tak, aby súvisel so svetom, v ktorom žijeme, aby študentov neodpudzoval, neučil ich zbytočnosti, ale pripravil ich pre život[1].

Pre stredné školy s humanitným zameraním by mala byť pripravená pútavá chémia zoznamujúca žiakov s chemickými princípmi dejov a s fyzikálno-chemickou podstatou vlastností látok, s ktorými sa každodenne stretávajú. Náplňou takejto „chémie pre nechemikov“ by aj u nás mohla byť „spotrebiteľská chémia“ (*Consumer chemistry*). Obsah tohto predmetu vyplýva z jeho cieľov, z ktorých prvým je pomôcť študentom pochopiť, ako chémia ovplyvňuje ich každodenný život, pripraviť ich na to, aby boli schopní rozhodovať o veciach súvisiacich s vedou a technikou a podporovať rozvoj kritického myslenia. Druhým cieľom je vychovávať k spotrebiteľským zručnostiam, ktoré súvisia s chémiou. Tretím cieľom spotrebiteľskej chémie je

učiť študentov, ako rozlišovať medzi vedeckým a pseudovedeckým.[2,3] Predmet chémia by teda mal vychovávať chemicky gramotných absolventov.

V prednáške sa budeme venovať obsahu „chémie pre nechemikov“ na zahraničných školách ako aj návrhu úpravy obsahu stredoškolskej chémie pre našich študentov.

Príspevok bol pripravený v rámci riešenia projektu KEGA 004TTU-4/2013 Tvorba vzdelávacích materiálov pre pregraduálne a celoživotné vzdelávanie učiteľov chémie a pre riešiteľov úloh chemickej olympiády.

[1] REGULI, J. *Neformálne vzdelávanie v oblasti chémie*. Bratislava : Vydavateľstvo STU 2001, 109 str. ISBN 80-227-1553-0.

[2] REGULI, J. Plasty a polyméry vo vyučovaní chémie *Výzkum, teorie a praxe v didaktice chemie XIX. 2. část.* Sborník přednášek 19. medzinárodní konference o výuce chemie, Hradec Králové 15.-17. 9. 2009, str. 173 – 179. ISBN 978-80-7041-839-0.

[3] REGULI, J. Príprava učiteľov ako informovaných spotrebiteľov. *Aktuálne trendy vo vyučovaní prírodovedných predmetov.* Bratislava : PriF UK 2007, str.247-250. ISBN 978-80-88707-90-5.

4P07
SCIFINDER A REAXYS - POROVNÁNÍ DVOU NEJDŮLEŽITĚJŠÍCH CHEMICKÝCH BÁZÍ DAT

Jaroslav Šilhánek

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 5, *silhanek@vscht.cz*

Program SciFinder, který umožňuje efektivní práci se souborem bází Chemical Abstracts a systém Reaxys, pod kterým se skrývají především báze Beilsten a Gmelin doplněné bází Patent Chemistry Database, představují v současné době již prakticky samozřejmé zdroje chemických vědeckých informací s více či méně zafixovaným povědomím, že se jedná o zdroje velmi nákladné, které z finančních důvodů nemusí být vždy a všude dostupné. Tato práce představuje pokus o porovnání rešeršních strategií a jejich výsledků v obou bázích a zodpovězení otázky, do jaké míry se získané informace překrývají. Potvrdil se předpoklad, že jak rešeršní strategie, tak získané výsledky, jsou především ovlivněny výchozí koncepcí původních tištěných zdrojů, hlavně v tom, smyslu, že báze Chemical Abstracts byly a stále jsou hlavně báze bibliografického charakteru, doplněné ovšem prakticky vyčerpávajícím souborem informací o existujících chemických sloučeninách včetně jejich strukturního zobrazení. Naproti tomu báze Beilstein a Gmelin, tvořící jádro systému Reaxys, vycházejí z koncepce soupisu všech známých organických a anorganických sloučenin, čerpaný sice z menšího souboru primárních zdrojů, ale na druhou stranu neoddělitelně doplňovaný údaji o jejich přípravě, přeměnách a všech známých fyzikálně-chemických vlastnostech. Je možné průkazně demonstrovat, že i přes pochopitelný překryv získaných informací z obou bází, nikdy se výsledky úplně nekryjí a jak výchozí koncepce, tak i stávající excerpční praxe vede při využití obou bází k informacím, které by byly jinak ztraceny.

4P08
EM3E – ZKUŠENOSTI S PŘÍPRAVOU A DVĚMA ROKY REALIZACE PROJEKTU ERASMUS MUNDUS

Ivona Sedlářová [1], Karel Bouzek[1], Vlastimil Fíla[1]

[1]*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, Česká republika, e-mail: ivona.sedlarova@vscht.cz*

Program Erasmus Mundus podporovaný Evropskou unií si klade za cíl ustavení studijních programů realizovaných ve spolupráci vybraných evropských univerzit zaměřených na moderní a dynamicky se rozvíjející oblasti. Tato spolupráce umožňuje kombinovat silné stránky jednotlivých partnerů a v důsledku toho dosáhnout výrazně vyšší kvality nabízeného vzdělání, než by bylo možné dosáhnout na jednotlivých pracovištích. Samozřejmostí je skutečnost, že posluchači absolvují jednotlivé semestry studia na různých univerzitách tvořících konsorcium. Dalším přínosem je pak možnost zapojení občanů zemí mimo Evropskou unii. To významným způsobem rozšiřuje pole výběru kvalitních posluchačů.

Tento příspěvek poskytuje stručný přehled historie vzniku úspěšného projektu, jeho postupné implementace a rovněž zkušenosti získané v průběhu prvních dvou let realizace.

Charakteristická z hlediska implementační fáze tohto typu projektu je široce proklamovaná podpora ze strany státní správy rerezentované MŠMT ČR. Zapojení veřejných vysokých škol do mezinárodních vzdělávacích konzorcií patří mezi prirority terciálního vzdělávání v ČR. Tato podpora však bohužel zůstává v deklaratorní rovině. Řešitel se v průběhu řešení setká zejména

s absencí jakékoliv zkušenosti a formálních pravidel definujících nezbytné administrativní postupy. Nedostatečná je rovněž spolupráce mezi jednotlivými zainteresovanými ministerstvy. Odměnou pedagogům však je výuka motivované skupiny posluchačů se zájmem o obor.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Evropské komise v rámci projektu č. 511935-1-2010-1-FR-ERA MUNDUS-EMMC (EM^{3}E)

4P09
VÝZNAMNÝ CHEMICI A VÝUČBA CHÉMIE

Milan Melicherčík[1], Danica Melicherčíková[2]

[1]*FPV UMB, Tajovského 40, 974 01 Banská Bystrica, Milan.Melichercik@umb.sk*
[2]*PF KU, Hrabovská cesta 1, 034 01 Ružomberok, danica.melichercikova@ku.sk*

Bez poznania histórie nie je možné porozumieť súčasnosti. Výučba chémie históriu približuje prostredníctvom uvedenia autorov objavov, významných chemikov. Zaujímalo nás, či v učebniciach chémie vydaných v rôznych časových obdobiach používaných v ČSSR, SR a ČR sa uvádzajú významné osobnosti chémie, obdobie v ktorom žili a podmienky za ktorých došlo k objavu.

V príspevku poskytujeme prehľad prezento–vaných významných vedcov podľa tematických celkov. Dominantný zoznam významných vedcov sa spája so stavbou a štruktúrou atómu, ako aj periodickou sústavou prvkov [1-3]. V oveľa menšej miere sú významní chemici prezentovaný v témach organickej chémie.

V sledovaných učebniciach použitých v SR a ČR sú určité rozdiely v prezentácii histórie chémie. České učebnice prinášajú hlbší pohľad do histórie, pretože uvádzajú roky v ktorom vedci žili, ale aj popis podmienok za ktorých k objavu dospeli. Prípadne sú uvádzaní aj vedci, ktorí tiež dospeli k rovnakúmu poznaniu, ale objav nie je s ich menom spájaný. V slovenských učebniciach absentujú informácie o úspechoch slovenských chemikov. V príspevku venujeme pozornosť možnosti využitia určitých životných etáp vedcov nielen vo vzdelávacej, ale aj výchovnej funkcii vyučovacieho procesu, ako aj pre rozvoj kompetencií prezentovaných Štátnym vzdelá–vacím programom (ISCED 3A).

Poďakovanie: Práca bola vypracovaná za finanmčnej podpory projektu KEGA č. 034KU-4/2011.

[1] Jiří Vacík a kol.: Chémia pre 1. ročník gymnázií. Bratislava : SPN, 1994.
[2] Jarmila Kmeťová a kol.: Chémia pre 1. ročník gymnázia so štvorročným štúdiom a 5. ročník gymnázia s osemročným štúdiom. Bratislava : Expol-pedagogika, 2012.
[3] Vratislav Flemr, Bohuslav Dušek: Chemie I pro gymnázia (obecná a anorganická). Praha : SPN, 2001.

4P10
VYDAVATEĽSKÁ ČINNOSŤ SLOVENSKEJ CHEMICKEJ SPOLOČNOSTI OD ROKU 1948 DO ROKU 2013

Michal Uher[1], Viktor Milata[1]

[1]*Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, rosamichal@zoznam.sk, viktor.milata@stuba.sk*

Vydavateľská činnosť Slovenskej chemickej spoločnosti od roku 1948 je veľmi široká a rôznorodá. Zahrňuje viacero typov publikačnej činnosti, ktorá sa v priebehu rokov menila podľa potrieb Spoločnosti ako aj finančných zdrojov. Na IX. Valnom zhromaždení Spolku chemikov Slovákov 5. decembra 1948 v Bratislave referoval Prof. Dr. T. Krempaský o vydavateľskej činnosti, kedy uviedol: „ Našu vydavateľskú činnosť treba rozdeliť na dve skupiny: 1. vydávanie periodického časopisu Chemické Zvesti a 2. vydávanie kníh a príručiek.“

V príspevku budú prezentované nasledovné aktivity:

- vydávanie prvého slovenského chemického časopisu Chemické Zvesti (od roku 1947)
- vydávanie spravodajcu pre členskú základňu Bulletin SCHS (1970-2004)
- vydávanie ChemZi ako nasledovníka Bulletinu SCHS (od roku 2005)
- príležitostné zborníky: 100 let Československé společnosti chemické, její dějiny a vývoj 1866-1966 (1966); Československá společnost chemická, Slovenská chemická spoločnosť 1966-1975 (1980); Československá společnost chemická při ČSAV, Slovenská chemická spoločnosť pri SAV 1976-1985 (1987); 70 rokov Pamätnica Slovenská chemická spoločnosť 1929-1999 (2001).

- vydávanie série monografií Chemický priemysel v zrkadle dejín Slovenska, ktorá vychádza v spolupráci so Slovenskou spoločnosťou priemyselnej chémie. Od roku 2010 vyšli nasledovné časti:

- Pilotný zväzok (2011)

- Vláknarský priemysel (2011)
- Gumárenský priemysel (2012)
- Farmaceutický priemysel (2013)

Vo vydavateľskej činnosti Slovenská chemická spoločnosť pokračuje, lebo nežije pre minulosť, ale ani na ňu nezabúda. Medzi neperiodické publikácie treba zaradiť aj zborníky venované sumarizácii celoživotného diela významných slovesnkých chemikov ako aj zborníkov z konferencií, seminárov a sympózií.

Viaceré z uvedených materiálov je možné dnes nájsť na webovej stránke Slovenskej chemickej spoločnosti (www.schems.sk) v sekcii Archív – Materiály SCHS v elektronickej forme, použiť ich na študijné účely resp. pri zachovaní podmienok Autorského zákona aj na ďalšie šírenie.

Práca je podporovaná grantom MŠ SR VEGA (2/0109/10) a KEGA 014-STU-4/2010 a 069-STU-4/2012.

4P11
ANGLICKÝ CHEMIK J. G. F. DRUCE (1894 – 1950) A JEHO VZŤAH K ČESKOSLOVENSKU

Ján Čaplovič

Bratislava

John Gerald Frederick Druce bol profesorom na Battersea Grammar School v Londýne. Počas štúdia na tamojšej univerzite sa spriatelil s Jaroslavom Heyrovským a na jeho podnet prišiel po 1. svetovej vojne do Prahy a získal ako prvý Angličan doktorát prírodných vied na Univerzite Karlovej.

G. Druce si Československo obľúbil, pravidelne ho navštevoval a celé precestoval. Vo vedeckých časopisoch publikoval viacero článkov o prírodovednom výskume v ČSR, recenzií kníh čs. autorov a nekrológov. Bol čestným členom Masarykovej akademie práce, dopisujúcim členom Kráľovskej českej spoločnosti náuk a v roku 1937 bol vyznamenaný Radom bieleho leva.

Napriek tomu, že vykonal mnoho práce pre propagáciu Československa, dnes je u nás celkom neznámy a zabudnutý.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 5
POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5P01
ELIMINÁCIA AKRYLAMIDU V SUŠIENKACH APLIKÁCIOU ASPARAGINÁZY

Zuzana Ciesarová[1], Kristína Kukurová[1], Lucie Marková[1,2], Ján Fencl[3]

[1]*VÚP Výskumný ústav potravinársky, Priemyselná 4, 824 75 Bratislava, ciesarova@vup.sk*
[2]*VUT Vysoké učení technické, Fakulta chemická, Purkyňova 464/118, 612 00 Brno, Česká republika*
[3] *Pečivárne Liptovský Hrádok s.r.o.,Liptovská Porúbka 347, 033 01 Liptovský Hrádok*

Výskyt akrylamidu, ktorý je nebezpečný kvôli svojim neurotoxickým, genotoxickým i pravdepodobne karcinogénnym vlastnostiam, je v potravinách známy viac ako 10 rokov. Úsilie o minimalizáciu jeho obsahu i expozície zo strany inštitúcií zodpovedných za bezpečnosť potravín, viedlo k súboru opatrení na predchádzanie jeho tvorby už počas výroby potravín. Napriek tomu, že doteraz neboli ustanovené legislatívne limity na obsah akrylamidu v jednotlivých potravinových komoditách, implementácia niektorých opatrení bola úspešne overená v priemyselnej prevádzke výroby sušienok na Slovensku.

U sušienok určených pre diabetikov s hodnotami akrylamidu v rozsahu 1 500 až 1 900 µg/kg bola aplikáciou enzýmu asparagináza dosiahnutá približne 50%-ná redukcia obsahu akrylamidu vo finálnych produktoch bez signifikantného vplyvu na kvalitatívne parametre výrobkov. Účinok asparaginázy spočíva v konverzii priameho prekurzora akrylamidu – aminokyseliny L-asparagín na kyselinu L-asparágovú, z ktorej sa akrylamid v procese Maillardovej reakcie netvorí. Vzhľadom na frekvenciu konzumácie sušienok medzi mládežou by zavedenie tohto opatrenia

mohlo znížiť celkovú expozíciu akrylamidom o približne 10 %.

Poďakovanie. Tento príspevok vznikol implementáciou projektu ITMS 26240220050 „Stratégia eliminácie akrylamidu v technologickom procese výroby potravín“ podporovaného Európskym fondom regionálního rozvoja v Operačnom programe Výskum a vývoj.

5P02
CEREAL-BASED FOOD PRODUCTS AND THEIR ROLE IN THE PREVENTION OF CIVILISATION DISEASE

Lucia Mikušová[1,2], Ernest Šturdík[1,2]

[1]Department of Nutrition and Food Assessment, Institute of Biochemistry, Nutrition and Health Protection, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology in Bratislava, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lucia.mikusova@stuba.sk
[2]STUVITAL, Ltd., Pionierska 15, 831 02 Bratislava

The aim of the research at the Department of Nutrition and Food Assessment is the development of new functional cereal products, which could be used in obesity and other civilisation disease prevention programs while keeping similar production costs. Based on analysis of cereal and pseudocereal fractions with fibre, antioxidant and prebiotic potential, six new products or product sets were prepared, tested and analysed lately. The cereal products had optimised technological parameters, acceptable sensory quality and contained health beneficial components in order to be utilised for the prevention of wide variety of liestyle disease, including cardio-metabolic complications. One of these products was a cereal fibre drink called Actiglucane, characterised as high in fibre (10% d.m.) and ß-glucans (8.5% d.m.) and low in fat (0.1% d.m.), energy value (124 kcal/100g f.w.). According to the molecular weight, Actiglucane was classified as a high molecular weight ß-glucan (1091kDa). Effectiveness of a 2-month long consumption of the above mentioned drink was tested in a combination with newly designed dance programe Bellylatinofit. Signifficant reduction in fat and energy intake was observed, what correlated well with improved anthropometric and biochemical parameters such as drop of fat mass and decrease in total and LDL cholesterol and atherogenic index.

The work was supported by the Agency of the Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic for the Structural Funds of EU in the frame of the Project “Evaluation of natural substances and their selection for prevention and treatment of lifestyle diseases” (ITMS 26240220040), by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. VMSP-II-0024-09 and by the Slovak Technical University grant for young researchers No. 1324.

5P03
CHELATUJÍCÍ MAKROPORÉZNÍ MIKROČÁSTICE JAKO POTRAVINOVÝ DOPLNĚK PRO LÉČBU WILSONOVY CHOROBY

Mattová Jana[1], Větvička David[1], Hrubý Martin[2], Kučka Jan[2], Králová Jaromila[4], Poučková Pavla[1], Zadinová Marie[1], Škodová Michaela[2], Vetrík Miroslav[2], Petřík Miloš[3], Nový Zbyněk[3], Beneš Jiří[1]

[1]Ústav biofyziky a informatiky, 1. LF UK v Praze
[2]Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i.
[3]Ústav molekulární a translační medicíny, LF UP v Olomouci
[4]Ústav molekulární genetiky AV ČR, v. v. i.

Wilsonova choroba je dědičné onemocnění metabolismu mědi, které má za následek oxidativní poškození především jater a mozku. Současná léčba je založená na použití nízkomolekulárních chelátorů pro zvýšení exkrece mědi, no trpí řadou vedlejších účinků. Novým přístupem je použití makroporézních polymerních mikročástic obsahujících skupiny selektivně chelatujících měď pro léčbu této choroby. Mikročástice jsou obecně nerozpustné, nevstřebatelné a z těla kompletně eliminovatelné.

Jako polymerní matrice byl zvolen poly(glycidyl methakrylát-co-ethylen dimethakrylát) obsahující ligand 8-hydroxychinolin, u kterého se sledovala nevstřebatelnost a stabilita systému při jeho průchodu gastrointestinálním traktem u potkanů, kde se polymer s navázaným ligandem radioaktivně označil pomocí $Na^{125}I$ a stanovila se odpovídající radioaktivita v jednotlivých orgánech pomocí ionizační komory. Nevstřebatelnost byla navíc podpořena pořízením obrazů z PET/CT kamery, kde se u myší sledovala dynamika polymeru s ligandem značeného pomocí $^{64}CuCl_2$.

Z pokusu in vivo pro nevstřebatelnost systému bylo zjištěno, že k vstřebání nebo uvolňování jednotlivých částí systému při jeho průchodu gastrointestinálním traktem nedochází, a to jednak změřením vykazování radioaktivity v jednotlivých orgánech, a jednak z obrazů PET/CT.

Práce vznikla za podpory grantu č. P304/12/0950 Grantové agentury České republiky.

5P04
SYNTETICKÉ SUBSTRÁTY HYDROXYCINAMOYLESTERÁZ PRE SCREENING A BIOKATALÝZU

Vladimír Mastihuba[1], Mária Mastihubová[1], Andrej Chyba[1]

[1]Chemický Ústav, Centrum glykomiky SAV, Dúbravská cesta 9, SK-845 38 Bratislava, chemvrma@savba.sk

Hydroxycinamoylesterázy (HCE), enzýmy hydrolyzujúce estery hydroxyškoricových kyselín a ich dimérov, sú objektom rastúceho záujmu biotechnológov, pretože ide o enzýmy napomáhajúce degradácii fytomasy s potenciálom auxiliárnych biokatalyzátorov pre biorafinérie. Aplikácie HCE sa hľadajú aj pri biokatalytickej inkorporácii hydroxyškoricových kyselín do zložiek kozmetických prípravkov, foto–protektívnych materiálov, biologicky účinných analógov prírodných liečiv a pod. Hoci rastú poznatky o nových zdrojoch HCE, problémom zostáva jednoduchá a rýchla identifikácia týchto enzýmov a kvantifikácia ich aktivity pre extenzívne screeningy. V prednáške predstavíme naše skúsenosti s vývojom a aplikáciou nových metód stanovenia dvoch HCE, feruloylesterázy a kafeoylesterázy, založených na nových chromogénnych esteroch hydroxyškoricových kyselín – 4-nitrofenyl feruláte, 4-metyl–umbeliferyl feruláte a 4-nitrofenyl kafeáte. Ide o jednoduché, rýchle a citlivé metódy, ktoré možno prispôsobiť aj pre extenzívnu analýzu veľkého počtu enzýmových preparátov. Predstavíme tiež prípravu aktivovaných esterov týchto kyselín (vinyl ferulátu, vinyl kafeátu a 2,2,2-trifluoroetyl ferulátu) vhodných pre enzymatické transesterifikácie katalyzované nájdenými HCE v syntézach, pri ktorých neprebieha priama esterifikácia voľnou kyselinou.

Práca bola podporená agentúrou VEGA (grant č. 2/0138/12).
Práca je tiež výsledkom implementácie projektu „Centrum excelentnosti metód a procesov zelenej chémie (CEGreen I)“ podporeného Operačným programom Výskum a vývoj finacovaným z Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

5P05
CHEMIKÁLIE Z POTRAVINÁRSKEJ BIOMASY

Stanislav Sekretár[1], Lenka Tmáková[1], Jarmila Hlásniková[1], Lenka Vrbiková[1], František Kreps[1], Štefan Schmidt[1]

[1]Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU Radlinského 9,
812 37 Bratislava, stanislav.sekretar@stuba.sk

Vedľajšie produkty a odpady potravinárskeho priemyslu sa v minulosti najčastejšie spracovávali kompostovaním, spaľovaním alebo sa použili ako krmivo pre dobytok. Súčasné separačné technológie nám umožňujú oveľa efektívnejšie spracovanie týchto produktov [1-3]. S využitím rôznych extrakčných, frakcionačných a rafinačných metód možno z odpadnej potravinárskej biomasy (živočíšneho i rastlinného pôvodu) získať hodnotné chemikálie s rôznym aplikačným využitím. Pre výrobcov potravín je tento prístup významný z ekologického i z ekonomického hľadiska. Najčastejšie sa z biomasy izolujú:

- antioxidanty - polyfenolické látky z rastlín, zo spracovania olejnín (šroty, dezodorizačný kondenzát), z hroznových výliskov,
- farbivá (rôzne typy) - z ovocia, zeleniny, hroznových výliskov, rastlín,
- povrchovo aktívne látky - zo srvátky, fosfolipidy z vaječného žĺtka, z rastlinných olejov, saponíny z rastlín,
- vonné a chuťové látky - z kvetov, rastlín, ovocia a zeleniny, z vínnych kalov,
- potravinárske prídavné látky - vitamíny, steroly, vláknina, pektín, bielkovinový hydrolyzát, cukry,
- biologicky účinné látky - pre farmáciu, kozmetiku, agrochemické a iné využitie,
- špeciálne chemikálie - diagnostické chemikálie a štandardy prírodných látok, chemikálie a opticky aktívne chemikálie pre syntézu resp. iné technické využitie.

Určitou formou využitia odpadov je aj spracovanie odpadných rastlinných olejov na biopalivo (cez metylestery alebo pyrolýzou v krakovacej jednotke).

Práca bola podporená grantom APVV 0850-11 a grantom VEGA 1/0860/13.

[1] Keith Waldron ed.: Handbook of Waste Management and Co-Product Recovery in Food Processing Vol 1 (2007) and Vol 2 (2009), CRC Press.
[2] Vasso Oreopoulou, Winfried Russ eds.: Utilization of By-Products and Treatment of Waste in the Food Industry. Springer Science (2007).

[3] Muthusamy Chandrasekaran ed.: Valorization of Food Processing By-Products. CRC Press (2012).

5P06
VPLYV OBALOVÉHO MATERIÁLU NA OXIDAČNÚ STABILITU TUKOV PRI ICH OHREVE

Jarmila Hlásniková[1], Tatiana Cimermanová[1], Stanislav Sekretár[1], Lenka Tmáková[1], Lenka Vrbiková[1], Štefan Schmidt[1]

[1]Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jarmila.hlasnikova@stuba.sk

Rastlinné oleje a živočíšne tuky patria medzi potraviny, ktorých trvanlivosť je spravidla niekoľko mesiacov pri dodržaní základných podmienok skladovania a spracovania. Pôsobenie tepla je jedným z faktorov, ktoré ovplyvňuje ich oxidačnú stabilitu. Taktiež druh ohrevu mikrovlnný (MO) či teplovzdušný (TO) rôzne pôsobí na potraviny a hlavne na ich tukové zložky.

Mikrovlnný ohrev v chémii je založený na efektívnom zohrievaní materiálu účinkami mikrovĺn. Tento ohrev spočíva v schopnosti materiálu absorbovať mikrovlnnú energiu a premeniť ju na teplo. Teplovzdušný ohrev predstavuje ohrev pri teplotách 50-300°C za pomoci horúceho vzduchu. Princíp teplovzdušného ohrevu je jednoduchý, tzv. suché teplo. Základ spočíva v zohrievaní potraviny pomocou horúceho vzduchu cirkulujúceho v ohrevnej rúre.

Cieľom tejto práce bolo zistiť a poukázať na rozdiely vznikajúce za rôznych podmienok ohrevu rastlinných olejov a živočíčneho tuku, ako aj potvrdiť, či vyvrátiť ochranný účinok použitých obalov pri ich ohreve, v našom prípade papiera a PET fólie.

V práci sme sledovali oxidačnú stabilitu jednotlivých tukov po ohriatí bez obalu a s rôznymi druhmi obalov. Ako vzorky potravín sme použili rastlinné oleje a bravčovu masť, ako vzorky obalov papier a PET fóliu. Oxidačnú stabilitu sme sledovali stanovením chemických parametrov daných vzoriek.

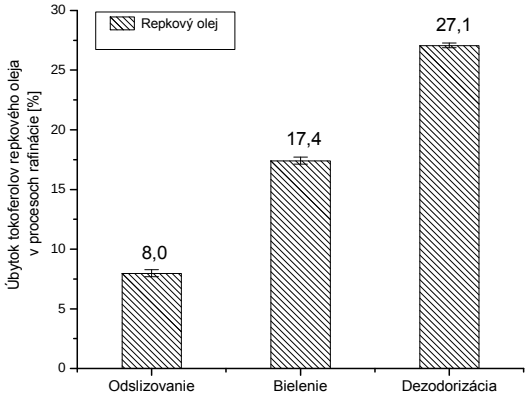
Práca bola podporená grantom APVV 0850-11 a grantom VEGA 1/0860/13.

5P07
VPLYV RAFINÁCIE REPKOVÉHO OLEJA NA OBSAH TOKOFEROLOV

František Kreps[1], Štefan Schmidt[1], Jan Kyselka[2], Vladimír Filip[2]

[1]Oddelenie potravinárskej technológie, FCHPT - STU, Radlinského 9/ 812 37 Bratislava, kreps.frantisek@gmail.com
[2]Ústav mléka, tuků a kosmetiky, VŠCHT, Technická 5/166 28 Praha, jan.kyselka@vscht.cz

Vplyvom rafinácie repkového oleja dochádza až k 44 %-nému úbytku tokoferolov oproti surovému oleju. Procesy s najväčším vplyvom na úbytok tokoferolov bývajú dezodorizácia, bielenie a neutralizácia pri chemickej rafinácii. Spravidla najmenšie úbytky tokoferolov sú pri devoskácii slnečnicového oleja a pri odslizovaní olejov. Dezodorizácia repkového oleja spôsobila 27 %-ný úbytok tokoferolov (obr.1), pričom maximálne straty tokoferolov pri dezodorizácii v Európe bývajú zväčšia okolo 25 % [1]. Bielenie býva kritickým procesom pri úbytku tokoferolov vzhľadom na adsorpciu tokoferolov a ich možnú oxidáciu na veľkom povrchu bieliacej hlinky. Úbytok tokoferolov repkového oleja vplyvom bielenia bol 17 %-ný. Pri rafinácii oleja nedochádza iba k úbytku tokoferolov, ale aj k ich degradácii. Najdôležitejšie oxidačné a degradačné produkty tokoferolov sme syntetizovali na potvrdenie vzniku týchto látok v oleji pri rafinácii.



Obr. 1 Vplyv procesov rafinácie repkového oleja na úbytok tokoferolov

Práca bola uskutočnená s finančnou podporou grantu VEGA No. 1/0860/13 a MSMT No. 20/2013.

[1] Shahidi Fereidoon.: Edible Oil and Fat Products, Edible Oils: Bailey's industrial oil and fat products, Wiley-Interscience. 6th ed., 2, 2005, 725 p.

5P08
SLEDOVANIE ZMIEN V OXIDAČNEJ STABILITE SLNEČNICOVÝCH OLEJOV

Lenka Vrbiková[1], Štefan Schmidt[1], František Kreps[1], Lenka Tmáková[1], Jarmila Hlásniková[1], Stanislav Sekretár[1]

[1]*Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT - STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lenka.vrbikova@stuba.sk*

Vo všetkých potravinárskych surovinách a produktoch sa nachádzajú vo väčšej alebo menšej miere produkty oxidácie lipidov [1]. Lipidy podliehajú oxidačnému kazeniu počas výroby a skladovania, čo sa prejavuje zmenou väčšiny kvalitatívnych kontrolných parametrov: farba, chuť, vôňa a nutričná hodnota, ktoré ovplyvňujú ich vhodnosť pre konzumáciu. Tieto zmeny vyvolávajú aktívne formy kyslíka, pričom vznikajú rôzne primárne a sekundárne produkty [2]. V práci sme skúmali oxidačnú stabilitu slnečnicových olejov získaných od 4 rôznych výrobcov, ktoré sme skladovali pri izbovej teplote a rozptýlenom svetle po dobu 10 mesiacov. Oxidačnú stabilitu sme sledovali metódou Rancimat, meraním množstva primárnych produktov oxidácie (hydroperoxidov) a konjugo–vaných diénových kyselín. Zistili sme, že počas skladovania slnečnicových olejov došlo k nárastu týchto zlúčenín, a teda k zníženiu ich stability. Pokles stability súvisí aj s degradáciou antioxidantov prítomných v skladovaných olejoch.

Práca bola podporená grantom APVV 0850-11 a grantom VEGA 1/0860/13.

[1] Štefan Schmidt: Antioxidanty a oxidačné zmeny tukov v potravinách. Slovenská technická univerzita v Bratislave. Bratislava 2010, 220 s.
[2] Malgorzata Nogala-Kalucka, M., Jozef Korczak, Małgorzata Dratwia, Eleonora Lampart-Szczapa, Aleksander Siger, Maciej Buchowski: Food Chemistry, 93, 2005, p. 227-235.

5P09
VÝZNAM POTRAVINÁRSKYCH TUKOV VO VÝŽIVE ČLOVEKA

Štefan Schmidt[1]

[1]*Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stefan.schmidt@stuba.sk*

Podľa WHO a FAO sú za rozvoj civilizačných ochorení zodpovedné najmä 4 živiny: nasýtené mastné kyseliny, *trans*-mastné kyseliny (*trans*-MK), sodík pochádzajúci najmä z kuchynskej soli a cukor, najmä pridaný. Podľa najnovších zistení sú pre ohrozenie zdravia najviac rizikové vysoký príjem NaCl a fajčenie [1].

Niektoré tuky do výživy patria a sú považované za prospešné zdraviu, iné sú odporúčané naďalej obmedzovať. Potrebné je brať do úvahy najmä zloženie mastných kyselín a nie pôvod tuku [2,3]. Zásadne treba odmietnuť zjednodušujúce tvrdenie o rizikovosti živočíšneho a výhodnosti rastlinného tuku (napr. rybie tuky *vs*. kokosový, či palmojadrový tuk). Práve masívne začleňovanie tropických rastlinných tukov do našej výživy možno považovať do budúcnosti za jeden z najväčších problémov v oblasti výživy. Prezentované sú niektoré základné chemické a výživové parametre v tukovom podiele masiel a zmesných tukových nátierok zakúpených v obchodnej sieti SR.

V prednáške je diskutovaná i skutočnosť, že hlavným prídavkom tukov rastlinného pôvodu sa stále viac stáva palmový olej, resp. jeho frakcie, čo je vzhľadom na vysoký obsah aterogénnej MK – kyseliny palmitovej, jav nežiaduci. Výsledné rastlinné tuky a maslá potom neprinášajú deklarovaný zdravotný benefit, skôr budú tieto potravinárske komodity zamerané na ekonomický benefit. Uvedené sú i niektoré genetické a environmentálne faktory spojené s aterosklerózou a aktuálny nový medicínsky princíp Lipoprint LDL.

Práca bola podporená grantom VEGA 1/0860/13 a APVV 0850-11.

[1] Pedersen, J., *et al.*: British Journal of Nutrition, 1-3, (2011).
[2] Brát, J., Schmidt, Š., Dostálová, J.: Cardiology, 18, 79-86, (2009).
[3] Schmidt, Š: Antioxidanty a oxidačné zmeny tukov v potravinách. Bratislava 2011, 220 s.

5P10
ALTERNATÍVNE ZDROJE RASTLINNÝCH OLEJOV Z BIOMASY

Štefan Schmidt[1], Lenka Vrbiková[1], František Kreps[1], Lenka Tmáková[1], Jarmila Hlásniková[1], Stanislav Sekretár[1]

[1]*Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, stefan.schmidt@stuba.sk*

Vedľajšie produkty a odpady agro-potravinárskeho sektoru predstavujú bohatý zdroj rôznych fytochemikálií. Problémom ostáva ich zvoz a separácia, najmä z ekonomického hľadiska [1,2]. V práci sa sledovali vybrané chemické a fyzikálne vlastnosti netradičných surovín rastlinného pôvodu (ovocná biomasa) a olejov z nich získaných. Ako referenčné vzorky sa použili semená slnečnice, repky olejnej, sóje, podzemnice a extrahované oleje z týchto olejnín, resp. strukoviny [3].

V analyzovaných jadrách a semenách ovocia sa obsah oleja pohyboval od 4,5 do 42 hm.%. Získané triacylglycerolové oleje boli z kategórie tzv. polovysýchavých s hodnotou jódového čísla 100 až 150 (% adovaného jódu). Prevládajúcou mastnou kyselinou v olejoch z kôstkovín je kyselina olejová a v olejoch zo semien jadrového ovocia je dominantnou mastnou kyselinou linolová kyselina. Obsah kyseliny linolénovej je stopový, s výnimkou oleja zo zvyškov ríbezlí.

Práca bola podporená grantom APVV 0850-11 a VEGA 1/0860/13.

[1] Vasso Oreopoulou, Winfried Russ eds.: Utilization of By-Products and Treatment of Waste in the Food Industry. Springer Science (2007).
[2] Muthusamy Chandrasekaran ed.: Valorization of Food Processing By-Products. CRC Press (2012).
[3] Schmidt, Š., Čanigová, M., Ševcová J.: Bulletin PV, 26, 289-297, (1987).

5P11
VYUŽITÍ FLOKULANTŮ MODIFIKOVANÝCH HUMINOVÝCH KYSELIN PRO ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

Iveta Musilová[1], Tomáš Weidlich[1], Petr Mikulášek[1]

[1]Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, 532 10 Pardubice, ivetka.m@centrum.cz, tomas.weidlich@upce.cz, petr.mikulasek@upce.cz

Cílem této výzkumné činnosti bylo odzkoušení nově připravených flokulantů na bázi modifikovaných huminových kyselin. Laboratorně připravené vícefunkční modifikáty huminových kyselin byly testovány pro adsorpce bazických barviv z odpadních vod (Methylenová modř, Astra Yellow, Rhodamin B). Odstranění organických barviv z odpadních vod bylo úspěšné. Účinnost nových flokulantů v porovnání s jednoduchými huminovými kyselinami byla vyšší.

Doposud získané výsledky poukazují na účinné odstranění kationtových barviv z vodného prostředí a tím i možné využití připravených flokulantů pro čištění odpadních vod z výroben barviv.

Poděkování: *Výzkumná činnost je financována z grantu SGFCh 05/2013.*

5P12
VYUŽITÍ SORBENTŮ PŘI ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY BARVIV

Hana Polednová, Tomáš Weidlich, Petr Mikulášek

Univerzita Pardubice, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 95, Pardubice 53210, hana.polednova@gmail.com

Tento příspěvek je zaměřen na studium účinnosti čištění modelových odpadních vod z výroby barviv s použitím sorbentů. Při experimentech byl sledován pokles absorbance roztoků barviv Astrazon Orange R a Astrazon Pink FG. Jako sorbenty byly použity huminové kyseliny připravené srážením humátu sodného s kyselinou sírovou, huminové kyseliny vysrážené stejným způsobem avšak společně s aktivním uhlím ve dvou různých hmotnostních poměrech, samotné aktivní uhlí a humát titanylu připravený ze sodných solí huminových kyselin a roztoku síranu titanylu.

5P13
REDUKTIVNÍ DEHALOGENACE VE VODNÉM ROZTOKU JAKO METODA BEZPEČNÉ DEGRADACE HALOGENOVANÝCH AROMATICKÝCH SLOUČENIN

Tomáš Weidlich[1], Lenka Krchová[1], Lubomír Prokeš[2]

[1]Univerzita Pardubice, Skupina chemických technologií, Ústav Environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Studentská 573, 532 10 Pardubice, tomas.weidlich@upce.cz
[2]Masarykova Univerzita, Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Žerotínovo nám. 9, Brno, prokes@chemi.muni.cz

Halogenované aromatické sloučeniny jsou důležitou složkou účinných látek jakými jsou léčiva, pesticidy, barviva a pigmenty či aditiva do plastů. Nevýhodou jejich využití je jejich biologická účinnost (toxicita) a velká stabilita v životním prostředí. Při jejich výrobě a aplikacích dochází ke vzniku především

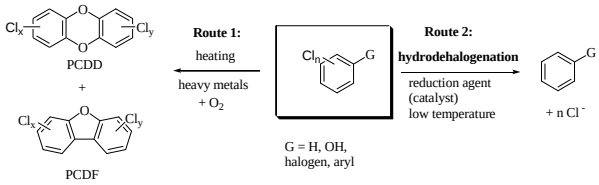
kapalných (včetně odpadních vod) a pevných odpadů, které je potřeba odstraňovat.

Nejběžnějším způsobem odstraňování halogenovaných aromatických sloučenin je jejich spalování za řízených podmínek ve spalovnách nebezpečného odpadu, přičemž však vznikají velmi stabilní a navíc toxické sloučeniny typu polychlorovaných bifenylů (PCB) a polychlorovaných dibenzodioxinů a dibenzofuranů (PCDD/F).

Na druhou stranu je známa řada redukčních metod použitelných pro rozklad halogenovaných aromatických sloučenin bez rizika vzniku PCB či PCDD/F. Tyto postupy bývají založené na působení plynného vodíku za katalýzy na speciálním katalyzátoru, který obvykle obsahuje platinové kovy [1].

Jinou možností je použití levných redukčních činidel na bázi neušlechtilých kovů, které se v protickém prostředí oxidují za uvolňování vodíku. Pro účinnou dehalogenaci halogenovaných aromatických sloučenin je obvykle nutné opět použít katalyzátory na bázi platinových kovů [2].

Jedno z mála činidel účinných pro hydrodehalogenaci halogenovaných aroma–tických sloučenin za normálního tlaku a labora–torní teploty je Raneyova Al-Ni slitina a v některých případech i Devardova Al-Cu-Zn slitina používaná pro stanovení dusičnanů a dusitanů ve vodách [3].



Obr. 1 Schéma degradace chlorovaných aromatických sloučenin za podmínek oxidace a redukce

Poděkování za finanční podporu na řešení problematiky odstraňování aromatických halogenderivátů z vodných roztoků Technologické agentuře ČR, projekt č. TA01010606.

[1] Akira Kume, Yasunari Monguchi, Kazuyuki Hattori, Hisamitsu Nagase, Hironao Sajiki: Pd/C-catalyzed practical degradation of PCBs at room temperature. Applied Catalysis B: Environmental 81 (2008) 274–282.

[2] Phillip Maloney, Robert DeVor, Simone Novaes-Card, Erin Saitta, Jacqueline Quinn, Christian A. Clausen, Cherie L. Geiger: Dechlorination of polychlorinated biphenyls using magnesium and acidified Alcohols. Journal of Hazardous Materials 187 (2011) 235–240.

[3] a) Weidlich, Tomas; Krejcova, Anna; Prokes, Lubomir: Hydrodebromination of 2,4,6-tribromophenol in aqueous solution using Devarda's alloy. Monatshefte fur Chemie 144(2) (2013) 155-162. b) Weidlich T., Prokeš L.: Facile dehalogenation of halogenated anilines and their derivatives using Al-Ni alloy in alkaline aqueous solution, Cent. Eur. J. Chem., 9(4), 590-597 (2011); c) Weidlich T., Krejčová A., Prokeš L.: Study of dehalogenation of halogenoanilines using Raney Al-Ni alloy in aqueous medium at room temperature, Monatshefte fuer Chemie, 141, (2010)1015-1020; d) Weidlich T., Prokeš L., Pospíšilová D.: Debromination of 2,4,6-tribromophenol coupled with biodegradation. Cent. Eur. J. Chem., Vol. 11(6), (2013) 979-987.

5P14
NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE ODPADNÍCH A PROCESNÍCH ODPADNÍCH VOD – MOŽNOSTI A OMEZENÍ ELEKTRO-FENTONOVY REAKCE

Libor Dušek[1], Lukáš Balcar[1], Barbora Horňáková[1]

[1]*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, Pardubice 53210, e-mail: libor.dusek@upce.cz, balcar.lukas@centrum.cz, barbora.hornakova@student.upce.cz, ladislav.novotny@upce.cz*

Tato práce je zaměřena na studium možností čištění procesních a odpadních vod z výroby aminoantrachinonových barviv a z papírenského průmyslu.

Přednáška je věnována nepřímé elektrochemické oxidaci problematických organických mikro–polutantů. Na příkladech kinetických studií jsou porovnávány výsledky dosažené pomocí oxidovated na bázi chloru a s využitím elektro-Fentonovy reakce. Jsou uvedeny rozličné způsoby uspořádání EF procesu, technologické podmínky a jejich účinnost. Značná poroznost je věnována také elektrosyntéze peroxidu vodíku na různých typech grafitových, borem dopovaných diamantových a platinových elektrod. Z namě–řených dat kinetických dat často vyplývá, že oxidace neprobíhá pouze elektro-Fentonovou reakcí, ale na oxidaci se podílí i reakce substrátů s H_2O_2 v kyselém prostředí a jejich oxidace přímo na anodě. To se projevilo např. při měření kinetik dekolorizace barviv pouze v prostředí H_2O_2, bez průchodu proudu elektrolyzérem a s a bez přítomnosti Fe^{2+} katalyzátoru Fentonovy reakce. Při průchodu proudu elektrolyzérem a za přítomnosti katalyzátorů, tedy probíhají nejméně

3 paralelní oxidační reakce, soutěžící o společný substrát. Výsledná pozorovaná rychlostní konstanta je tedy dána součtem dílčích, v různé míře se uplatňujících, rychlostních konstant, z nichž příspěvek elektro-Fentonovy reakce převažuje.

Tento příspěvek byl financován projektem MŠMT (FRVS/2013/423).

[1] Dušek L.: Chem. Listy 104, 846-854 (2010).
[2] Dušek, L., Vystrčilová, B., Novotný, L.: Chemicke Listy, 106, 1054-1060 (2012).

5P15
NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE VYBRANÝCH AMINO–ANTRACHINONOVÝCH A KATIONAKTIVNÍCH BARVIV

Barbora Horňáková[1], Libor Dušek[1], Ladislav Novotný[1], Jaromíra Chýlková[1], Lenka Bandžuchová[1]

[1]Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, Pardubice 53210, e-mail: barbora.hornakova@student.upce.cz, libor.dusek@upce.cz, ladislav.novotny@upce.cz, jaromira.chylkova@upce.cz, lenka.bandzuchova@upce.cz

Tato práce je zaměřena na studium možností čištění procesních a odpadních vod z výroby aminoantrachinonových barviv a z papírenského průmyslu.

Nepřímá elektrochemická oxidace zmíněných barviv byla prováděna v prostředí roztoku chloridu sodného. Proces probíhal na stabilních elektrodách prvního druhu při pH prostředí 3,5-11 a byl sledován pomocí UV-VIS spektrometrie při absorpčním maximu jednotlivých barviv.

Elektrochemicky oxidovaná barviva byla Acid Blue 80, Acid Blue 129, Acid Green 25, Acid Green 27, Acid Blue 62, Basic Yellow 90 a Basic Yellow 96. Stupeň oxidace, respektive mineralizace byl posuzován na základě parametru CHSK, TOC a AOX. U vybraných barviv byla provedena GC-MS analýza a sestavena rozkladná schémata těchto barviv.

Výzkumné práce jsou financovány projektem (SGFChT 05/2013).

5P16
POROVNÁNÍ ÚROVNĚ ZNEČIŠTĚNÍ U ZÍSKANÝCH FILTRÁTŮ ZE SRÁŽENÍ REAKTIVNÍCH BARVIV IONTOVÝMI KAPALINAMI NA ZÁKLADĚ SROVNÁNÍ UKAZATELŮ $CHSK_{CR}$, BSK_5 A AOX

Jana Martinková[1], Tomáš Weidlich[1], Petr Mikulášek[1]

[1]Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 53210, jana.martan@email.cz

Tento příspěvek je zaměřen na studium účinnosti odstraňování ve vodě rozpustných kyselých barviv z modelových odpadních vod použitím fosfoniové a amoniové iontové kapaliny.

Při experimentech byla studována účinnost odstraňování reaktivních azobarviv Ostazinové modři H2-G, Ostazinové červeni H-3B a Ostazinové žluti V-4G.

Azobarviva byla z vodných roztoků odstraňována srážením pomocí fosfoniové iontové kapaliny trihexyltetradecylfosfonium chloridu a amoniové iontové kapaliny Aliquat 336.

U získaných filtrátů byly následně získány a porovnány parametry absorbance, AOX, BSK_5 a $CHSK_{Cr}$.

Poděkování: Výzkumné práce jsou financovány projektem (SGFChT 05/2013).

5P17
KONTAMINACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NA SLOVENSKU ZPŮSOBENÁ ČINNOSTÍ SOVĚTSKÉ ARMÁDY

Ivan Mašek[1], Dušan Vičar[1]

[1]Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, Fakulta logistiky a krizového řízení, Studentské nám. 1532, 686 01 Uherské Hradiště, masek@flkr.utb.cz

V letech 1991 – 1992 byly provedeny rekognoskace terénu a 40 objektů používaných sovětskými útvary a zařízeními od roku 1968.

Ve Východoslovenském kraji byla situace nejjednodušší. V jednotlivých lokalitách byla zjištěna a potvrzena kontaminace zeminy a povrchových vod ropnými látkami, v Rožňavě byl zjištěn zvýšený obsah fosforečnanů a fenolu. V Kežmarku, Rožňavě a Jelšavě bylo navrženo dlouhodobě sledovat kontaminaci.

Na teritoriu Středoslovenského kraje byla kontaminace nejrozsáhlejší. Byla potvrzena kontaminace RL, organické kontaminanty byly zjištěny v povrchových vodách řeky Hron a Vlčný Potok, potvrzena kontaminace

anionaktivními tenzory a byla zjištěna anomálie v kontaminaci kovy, zejména Cu, Hg, Cd, As a Sb. V prostorech chovu hospodářských zvířat byl prokázán zvýšený obsah anorganických složek, amonné ionty, dusičnany, dusitany a chloridy. V jednom případě byla zjištěna kontaminace bakteriemi *Staphylococcus aureus* $4.ml^{-1}$.

Na teritoriu Západoslovenského kraje byla největší kontaminace zjištěna v Komárně a Nemšové. Byla prokázána kontaminace horninového prostředí a sekundární znečištění podzemních vod. Na kontaminaci prostředí vedle ropných látek se podílely PCB, halogenované pesticidy, aromáty a těžké kovy.

Souhrn nákladů na sanaci území Slovenské republiky byl vyjádřen částkou 1 105 448 480 Kčs. Dodnes jsou možné nálezy černých skládek materiálu všeho druhu, včetně cvičné a ostré munice, a dosud neobjevené kontaminace ohrožující životního prostředí na Slovensku.

[1] Mašek, I., Mičan, J.: Průzkum prostorů po Střední skupině vojsk převzatých ČSA. [Závěrečná výzkumná zpráva], Brno, 1992, VÚ 070, 104 p.
[2] Mašek, I., Matoušek, J., Mičan, J.: Environmental pollution of formel societ garrisons in Czechia and Slovakia. Environmental Enginnering and Pollution Prevention. Kluwer Academic Publisher, Dordecht, p. 85-90, 1995, 0-7923-4206-2.

5P18
DEVASTACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NĚKTERÝCH ÚZEMÍ STŘEDNÍHO SLOVENSKA SOVĚTSKOU ARMÁDOU A SOUČASNÁ REALIZOVANÁ OPATŘENÍ

Zdeněk Šafařík[1], Dušan Vičar[1]

[1]Tomas Bata University in Zlin, nám. T. G. Masaryka 5555, 760 01 Zlin, Czech Republic, Fakulta logistiky a krizového řízení, Studentské nám. 1532, 686 01 Uherské Hradiště, safarik@flkr.utb.cz

Vstupem cizích armád na území bývalého Československa v roce 1968 se kromě jiných postupně objevily i problémy, které souvisely se životním prostředím. Podíl ozbrojených složek na devastaci životního prostředí je zřejmý z výsledků realizovaných průzkumů, rekognoskací a analýz vzorků z kontaminovaných území a lokalit v letech 1991 – 1992.

Za zdroj kontaminace a devastace životního prostředí byly označeny útvary Sovětské armády. Informace o stavu životního prostředí nebyly v minulosti (do roku 1989) zveřejňovány téměř vůbec. Situace v oblasti informovanosti veřejnosti se změnila až po roku 1989.

Cílem příspěvku je poukázat na skutečnosti, které souvisejí s pobytem sovětských vojsk na území bývalého Československa s akcentem na poškozená území středního Slovenska. Předmětem zájmu jsou území a lokality Sliač – Vlkanová, VVP Lešť, Zvolen a okolí, Vrútky, Ružomberok a Rimavská Sobota a jejich stručná charakteristika z hlediska znečištění životního prostředí ropnými látkami a dalšími škodlivými látkami.

Sanace a monitorování lokalit Rimavská Sobota, Sliač a Vlkanová, poškozených činností bývalé Sovětské armády, vyšla v letech 2003 až 2008 Slovenskou republiku na 3 725 984 €.

[1] ŠAFAŘÍK, Z. & al.: 1986. Aktualizácia preventívnych opatrení ochrany prírody v okrese Žiar nad Hronom. Žiar nad Hronom: ONV, odbor kultúry. 157 s.
[2] ŠAFAŘÍK, Z. & al.: 1990. Žiarska kotlina volá SOS (materiál pre zasadnutie Federálnej vlády). Žiar nad Hronom: Okresný úrad životného prostredia.
[3] http://www.24hod.sk/Na-sanaciu-lokalit-po-Sovietskej-armade-sme-dali-3-725-984,20-%E2%82%AC-cl80943 .html, 29.5.2013.

5P19
SLEDOVANIE POVRCHOVO AKTÍVNYCH VLASTNOSTÍ FYTOCHEMIKÁLIÍ ZO ZDROJOV BIOMASY

Lenka Tmáková [1], Stanislav Sekretár[1], Jarmila Hlásniková[1], Lenka Vrbiková[1], Štefan Schmidt[1]

[1]Oddelenie potravinárskej technológie, Ústav biotechnológie a potravinárstva, FCHPT STU Radlinského 9, 812 37 Bratislava, lenka.tmakova@stuba.sk

V poslednej dobe sa biomasa stala populárnym termínom. Hlavnou jej výhodou je, že patrí medzi obnoviteľné zdroje a jej používanie nezaťažuje životné prostredie. Zaujímavými zdrojmi sú niektoré rastlinné materiály obsahujúce povrchovo aktívne zlúčeniny – saponíny, ktoré majú čistiace účinky. Čistiace prostriedky získané z prírodných materiálov sa používajú aj v súčasnosti. Saponíny majú vlastnosti mydla a v minimálnej koncentrácii sa vyznačujú silnou penivosťou a aj preto sa uplatňujú v kozmetickom (šampóny, tekuté mydlá a pod.) a potravinárskom priemysle (sladidlá, prídavky do šumivých nápojov atď.). Mnohé z nich sú rozšírené v rastlinách poľnohospodárskeho významu a niektoré sú základnými prvkami ľudskej stravy.

Pomerne často sa vyskytujú v rastlinách a dodnes boli popísané asi v 100 čeľadiach. Vyskytujú sa v zelenine, ako je sója, fazuľa, šošovica, špenát ďalej v paradajkách, zemiakoch, cesnaku, cibuli. Saponíny sú účinnými látkami mnohých fytofarmák. Veľká štrukturálna rozmanitosť saponínov podmieňuje množstvo zaujímavých biologických a farmakologických aktivít zistených u jednotlivých saponínov alebo ich zmesí.

V našej práci sme preskúmali povrchovo aktívne vlastnosti metanolových extraktov získaných z rôznych bylín.

Práca bola podporená grantom APVV 0850-11 a grantom VEGA 1/0860/13.

PREDNÁŠKY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6P01 TERMICKÉ KRAKOVANIE POLYALKÉNOVÝCH ODPADOV

Boris Jambor, Elena Hájeková, Martin Bajus

Oddelenie technológie ropy a petrochémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, tel. č.: 004212 529 325 457 E-mail: boris.jambor@stuba.sk

Predmetom štúdia bolo získať poznatky z terciárnej recyklácie poylalkénových odpadov pomocou termického krakovania. Práca bola zameraná na porovnanie zloženia a množstva jednotlivých produktov pri termickom krakovaní aditivovaných odpadných polyalkénov vyseparovaných z komunálneho odpadu a priemyselného odpadu a neaditivovaných poly–alkénov a ich zmesí. Ako surovinu pre experimenty s odpadnými polymérmi boli použité výrobky každodenného použitia, ako potravinové obaly, obaly od kozmetických výrobkov, uzávery z PET fliaš, vrecúška a tiež priemyselný odpad z výroby polypropylénových vlákien. Termický rozklad sa uskutočnil v laboratórnom vsádzkovom reaktore pri teplote 450°C. Analýzy olejovoskov a plynov z termického štiepenia potvrdili, že pokiaľ polymérny odpad nie je znečistený iným polymérom, je možné získať kvalitnú uhľovodíkovú surovinu pre ďalšie spracovanie. V tejto práci je tiež preukázaný minimálny vplyv aditívov v polyalkénovom odpade, pretože rozdiely medzi výťažkami profilujúcich zložiek v plynoch a olejovoskoch z krakovania použitých a nových plastov nepresahovali 5 %. V plynných produktov bola analýza zameraná na oxid uhličitý a oxid uhoľnatý, pretože boli viditeľné rozdiely vo výťažkoch, čo mohlo byť spôsobené aditívami, ktoré obsahujú kyslík.

V práci bola riešená aj problematika recyklácie polyalkénového odpadu znečisteného poly–vinylchloridom. Tento polymér je často používaný i napriek tomu, že neaditivovaný polyvinylchlorid obsahuje až 56 %hm. chlóru. Keďže má vysoký obsah chlóru, je jeho spracovanie náročné na materiál armatúr a reaktora. Našim cieľom bolo zachytávať chlór vo forme chlorovodíka priamo v reaktore reakciou s uhličitanom vápenatým. V závislosti od typu suroviny bolo možné takto zachytiť až 95 %hm. chlóru.

Práca bola financovaná GA SR - VEGA , č. grantu 1/0228/12.

6P02 OPTIMALIZACE KINETICKÝCH PARAMETRŮ PYROLÝZY UHLOVODÍKŮ VE ZOBECNĚNÉM MATEMATICKÉM MODELU

Petr Zámostný[1], Adam Karaba[1], Natália Olahová[2], Jiří Petrů[1], Jan Patera[1], Elena Hájeková[2], Martin Bájus[2] a Zdeněk Bělohlav[1]

[1]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Ústav organické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, petr.zamostny@vscht.cz, [2]Slovenská technická univerzita, Oddelenie technológie ropy a petrochémie, Radlinského 9, SK-812 37 Bratislava

Matematické modely pyrolýzy uhlovodíků v poslední době velmi často používají přístup automatického generování reakční sítě, který umožňuje systematické a komplexní zpracování kinetického modelu na dané úrovni složitosti. Tento přístup však sám o sobě neřeší problém získání spolehlivých kinetických parametrů

reakčního systému, jelikož publikované údaje jsou do jisté míry specifické pro konkrétní použitý reaktor.

Tato práce popisuje přístup k optimalizaci kinetických parametrů v modelu pyrolýzy uhlovodíků PYROL, jehož kinetická část je založena na automaticky generovaných reakčních sítích. Kinetické parametry jsou vyjadřovány metodou skupinových příspěvků, charakte–rizujících strukturu v okolí reakčního centra. Hodnoty příspěvků byly získány z literárních dat a dále zpřesněny regresní analýzou pro níž byla použita experimentální data měřená na dvou různých pyrolýzních reaktorech. Data z pulzního mikroreaktoru reprezentovala pyrolýzu strukturně široké množiny uhlovodíků za standardních podmínek, data z průtočného reaktoru na druhé straně zahrnovala pouze pyrolýzu heptanu, avšak v širokém rozmezí podmínek. Výsledný model s optimalizovanými parametry byl testován na validační sadě dat z obou experimentálních reaktorů, která nebyla použita pro jeho optimalizaci. Na základě porovnání výsledků simulací se ukázalo, že model, jehož parametry byly optimalizovány na kombinované sadě experimentálních dat, poskytuje mnohem lepší zobecnění a je schopen adekvátně simulovat pyrolýzu uhlovodíků v obou laboratorních reaktorech.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2013) a GA SR - VEGA , č. grantu 1/0228/12.

6P03
VODÍKOVÁ EKONOMIKA A JEJÍ ROLE V ENERGETICE

Karel Bouzek [1*], Martin Paidar[1]

[1]*Ústav Anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, Česká republika*
**E-mail: bouzekk@vscht.cz*

V současnosti již vstoupil do veřejného povědomí pojem „palivový článek“ jako technologie pro účinnou konverzi chemické energie paliva na elektrickou. Dosud však poměrně stranou této informovanosti zůstává skutečnost, že palivové články představují pouze jednu ze součástí širšího schématu označovaného obvykle jako *vodíková ekonomika*. Vodík jako prvek hraje ve všech technologiích sdružených pod tímto označením klíčovou roli.

Primární rolí, kterou plní, je takzvaný nosič energie. Hlavním důvodem volby vodíku jako klíčového prvku jsou vysoká energie vazby vodíku s kyslíkem, jeho vysoká reaktivita a dále pak jeho dostupnost, zejména vázaného ve vodě. Hlavním cílem vodíkové ekonomiky je pak skladování zejména okamžitých přebytků energie a její následné zpětné získání ve vhodný okamžik s co nejvyšší účinností. Základními stavebními jednotkami vodíkové ekonomiky jsou tedy technologie pro konverzi především elektrické energie na chemickou nesenou vodíkem, skladování vodíku a konverze chemické energie zpět na elektrickou.

Právě tento základní cíl definuje roli vodíkové ekonomiky v budoucí energetické politice státu. S využitím široké škály technologií umožnit co nejefektivnější využití instalovaných zdrojů energie různých druhů a snížit závislost zejména na fosilních palivech dovážených z nestabilních regionů.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Ministerstva průmyslu a obchodu České republiky v rámci projektu č. FR-TI2/442.

6P04
POROVNÁNÍ STABILITY PLATINOVÝCH A PLATINUM-KOBALTOVÝCH KATALYZÁTORŮ PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY TYPU PEM

Jakub Mališ[1], Luis Cesar Colmenares Rausseo[2], Svein Sunde[3], Karel Bouzek[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6, jakub.malis@vscht.cz*
[2]*Stiftelsen SINTEF, Sluppen 4760, 7460, Trondheim*
[3]*Norges teknisk-naturvitenskapelige universitet, Høgskolevn 1, 7491, Trondheim*

V posledních letech probíhá intenzivní vývoj palivových článků coby alternativního zdroje energie pro mobilní aplikace, zejména pak v oblasti automobilového průmyslu a osobní elektroniky. Většímu rozšíření palivových článků do praxe však dnes brání zejména jejich vysoká cena zapříčiněná, mimo jiné, použitím nákladných membrán a katalyzátorů na bázi platinových kovů. S cílem snížit náklady spojené s použitých drahých kovů je věnována pozornost vývoji nových katalyzátorů dosahujících již při nízkých navážkách vysokého elektrokatalyticky aktivního povrchu, nebo obsahujících slitiny platiny s levnějšími kovy.

Vedle ceny představuje další důležitý parametr stabilita katalyzátoru a s tím spojená životnost vlastního palivového článku. Ta by měla dosahovat v závislosti na typu aplikace až 40 tisíc

provozních hodin. V rámci této práce byly studovány katalyzátory na bázi slitiny platiny s kobaltem. Zjištěné charakteristiky byly následně porovnány s klasickým platinovým kata–lyzátorem. Sledovanými parametry byly elektrochemická aktivita katalyzátoru a jeho degradce v čase. Použit byl degradační protokol simulující podmínky při provozu automobilu. Pomocí metody cyklické voltametrie byl sledován vývoj elektrochemicky aktivního povrchu katalyzátoru v závislosti na čase jeho degradace. Elektrochemická impedanční spektroskopie pak umožnila studovat změny vlastností katalytické vrstvy. S využitím transmisní elektronové mikroskopie pak byla sledována velikost, distribuce a tvar částic elektrokatalyzátoru v katalytické vrstvě.

Tento příspěvek vznikl za finanční podpory Ministerstva průmyslu a obchodu ČR v rámci projektu číslo FR-TI2/442.

6P05
MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ PROCESU VÝROBY VODÍKU VYSOKOTEPLOTNÍ ELEKTROLÝZOU VODNÍ PÁRY

Roman Kodým[1], Filip Karas[1], Martin Paidar[1], Karel Bouzek[1]

[1]*Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, kodymr@vscht.cz*

Vysokoteplotní elektrolýza vodní páry představuje perspektivní metodu výroby čistého vodíku pro potřeby tzv. vodíkového hospodářství. Tento proces využívá keramický elektrolyt a pracuje při teplotách od 700 °C do 900 °C. Výhodou vysoké provozní teploty jsou nižší nároky na elektrický příkon z důvodu (*i*) vyšší rychlosti elektrochemických dějů a (*ii*) nižšího rovnovážného napětí cely v porovnání s konvenční nízkoteplotní elektrolýzou vody probíhající při teplotách do 100 °C. Mimo jiné odpadá potřeba platinového katalyzátoru pro zajištění dostatečné rychlosti elektrochemických reakcí. Ekonomicky je však tento proces realizovatelný až ve spojení se stabilním a levným zdrojem tepla o vysoké teplotě, kterým může být například jaderný reaktor IV. generace, nebo koncentrované sluneční paprsky.

Prezentovaný příspěvek je zaměřen na teoretický matematický popis procesu vysokoteplotní elektrolýzy vodní páry. Modelová cela sestává z 0^{2-} permselektivní YSZ (yttriem stabilizovaný oxid zirkoničitý) membrány oddělující Ni−YSZ katodu a LSM (Sr dopovaný $LaMnO_3$) anodu perovskitové struktury. Model je dvojrozměrný a zahrnuje bilanci hmoty, náboje a tepla umožňující předpovědět lokální rozložení koncentrací, elektrického potenciálu a teploty uvnitř cely. Výsledky modelu jsou konfrotovány s experimetnálními měřeními provedenými na laboratorní cele při různých provozních podmínkách. Takto ověřený model je následně použit při studiu a optimalizaci tohto procesu.

Autoři děkují Ministerstvu průmyslu a obchodu České republiky za finanční podporu tohoto výzkumu v rámci programu TIP č.: FR-TI3/561.

6P06
ETHERIFICATION OF GLYCEROL BY TERT.BUTYL ALKOHOL IN FLOW REACTOR

Andrej Turan[1], Dušan Mravec[1], Alexander Kaszonyi[1]

[1] *Department of Organic Technology, Faculty of Chemical and Food Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, andrej.turan@stuba.sk*

Due to global effort to lower dependence on fossil fuels, the amount of produced glycerol on world markets still rises (process FAME) [1]. Demands for glycerol in pharmaceutical and fine chemicals industry is not high enough compare to amount of produced glycerol. Bio-glycerol can be used for manufacturing many different commodity chemicals.

In our previous research [2] we studied tert-butylation of glycerol with isobutylene and tert-butyl alcohol to glycerol tert-butyl ethers (GTBE) over different homogeneous and heterogeneous acid catalysts. GTBE and especially di-, respective di- and tri- tert-butyl ethers of glycerol can be potentially used as oxygenate additives to diesel or to the mixture of diesel and FAME. These ethers have good effect on lowering of solid particles and other pollutants in exhaust gases [3].

We have studied etherification of glycerol with tert-butyl alcohol in flow reactor. Etherification has been studied in temperature range from 65°C to 120°C and preasure range from 1 MPa to 3MPa. As catalysts two commercial heterogeneous acid catalysts zeolite Beta (CP 814 E) and polymeric acid catalyst Amberlyst 35 Dry were used.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency under the contract No. APVV-

0133-11 and by ERDF project No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

[1] J.A. Melero, G. Vincente, G. Morales, M. Paniagua, J. Bustane, *Fuel* **2010**, 89, 2011-2018;
[2] K. Klepáčová, D. Mravec, M. Bajus, *Appl. Catal. A: General*, **2007**, 238, 1-13;
[3] A. Jaecker-Voirol, I. Durand, G. Hillion, B. Delfort, X. Montagne, *Oil & Gas Science and Technology*, **2008**, 63, 395-404;

6P07
KINETICS STUDY OF THE REACTION OF GLYCEROL AND UREA TO GLYCEROL CARBONATE

László Seemann, Alexander Kaszonyi, Lívia Lépesová

Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, laszlo.seemann@stuba.sk

Glycerol is an interesting renewable intermediate material. Nowadays it comes mainly from FAME production that has a fast growing tendency. The growth is controlled by law that prescribes to use FAME as bio-additive to gasoil. The surplus of bioglycerol allows plenty of routes to transform it into other high-valued compounds. One of those ways is to produce glycerol carbonate via reacting glycerol and urea at the presence of catalyst. According to recent studies the best catalyst is based on Zn(II) salts or oxide [1, 2]. Zinc oxide during reaction is transformed to zinc glycerolate. This catalyst system allows high selectivity to glycerol carbonate at high conversion of glycerol (S_{GC} > 77 %, X_G > 86%) even after catalyst recycling in the batch reactor. When soluble zinc chloride is used as catalyst, the reaction rate is higher, but the catalyst recycling is problematic. To understand the mechanism of studied reaction a kinetic study was made. Important information about the speed of formation of intermediate, main and by-products were observed. The rate of glycerol carbonate decomposition to glycerol and CO_2 was also studied.

Acknowledgements
This work was supported by VEGA 1/0556/13 and ERDF under the contract No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

[1] J-L. Dubois, M. Aresta: EP2174937A1, (2010)
[2] L. Seemann, Diploma thesis, (2010)

6P08
PD-BI NANOPARTICLES FOR OXIDATION OF BIOGLYCEROL IN FIXED-BED REACTOR

Stanislav Vajíček, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi

Slovak University of Technology, Department of Organic Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava stanislav.vajicek@stuba.sk, magdalena.stolcova@stuba.sk

Biomass-derived glycerol is a potent starting material for numerous very high value-added products and intermediate in fine chemistry [1]. Noble metals, such as palladium, platinum and gold loaded on activated carbon, graphite or metal oxides have been the subject of intensive investigations in liquid phase oxidation of glycerol [2]. In the present work palladium and bimuth nanoparticles supported on microporous gel-type functional organic ion-exchange resin were prepared and studied as catalysts for the liquid phase oxidation of glycerol to mono- and dicarboxylic acids by molecular oxygen in fixed-bed reactor at reaction temperature of 30-50°C and atmospheric pressure.

In basic reaction media, the glycerol conversion is proportional to content of Pd in the range of 1-3 wt.% on the catalysts, however, the selectivity of desired products decreases at higher loading. The doping with bismuth increases the efficiency of the catalysts. Varying the Pd/Bi ratio influenced the catalytic performance. Between palladium and bismuth species synergism was observed. An increase in reaction temperature resulted in an over-oxidation of the formed mono- and dicarboxylic acids. The addition of NaOH enabled increase the production of desired products. An important role in products formation play the amount of used catalyst and the flow-rate of reactants.

This work was supported by the Slovak Grant Agency under contract No. APVV- 0133-11 and ERDF under the contract No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

[1] B. Katryniok, H. Kimura, et al.: Green Chemistry, (2011)
[2] I. Sobczak, K. Jagodzinska, M. Ziolek: Catal. Today, (2010)

6P09
INDIUM PROMOTED COPPER AND NICKEL BASED CATALYSTS FOR HYDROGENOLYSIS OF GLYCEROL

Andrej Ševčík[1], Alexander Kaszonyi[1]

[1]*Slovak University of Technology, Department of Organic Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava andrej.sevcik@stuba.sk*

Glycerol is a renewable and cheap feedstock. The catalytic conversion of glycerol into more valuable components has received increasing attention from researchers all over the world [1]. A relevant and attractive glycerol valorization route from industry and academic points of view consists in its chemical transformation into 1,2-propanediol and 1,2-ethanediol via hydroge–nolysis and dehydration reactions with hetero–genous catalysts [2]. These diols are important commodity chemicals widely used in the manufacture of polyesters resins, surfactants, pharmaceuticals and functional fluids [3].

Bimetallic catalysts usually show properties that are distinct from those of containing one of the metals only. Addition of a second metal component offers opportunity to obtain new catalyst with enhanced activity, selectivity and stability. Various preparation methods of the catalysts and different reduction temperatures were studied in a fixed-bed down-flow glass reactor at mild conditions. Almost total conversion of glycerol and high selectivities to diols were obtained. It was found out, that positive effect of adding indium in these types of catalysts improves the formation of 1,2-propanediol.

This work was supported by the Slovak Grant Agency VEGA project 1/0556/13 and ERDF under the contract No. HUSK/1101/1.2.1/0318.

[1] W. Zhao, Ch. Yi, B. Yang, J. Hu, X. Huang: Fuel Processing Technology, Vol. 112, 70-75, (2013)
[2] D.D. Martín, M. Ojeda, M.L. Granados, J.L.G. Fierro, R. Mariscal: Catal. Today, Vol. 210, 98-105, (2013)
[3] X. Chen, X. Wang, S. Yao, X. Mu: Catal. Communications, Vol. 39, 86-89, (2013)

6P10
SELECTIVE CATALYTIC OXIDATION OF BIOMASS-DERIVED ALKANE TO ALKOHOL AND ALDEHYDE

Veronika Hergelová, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi

Department of Organic Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
vhergelova@gmail.com, agdalena.stolcova@stuba.sk

Selective transformation of biomass-derived platform molecules is one of the the biggest challenges for the modern chemical industry. Methane as the simplest alkane offers huge potential as a platform molecule. It is a main component of natural gas and biogas. The selective oxidation of methane to methanol and formaldehyde is difficult task in catalysis due to the high activation energy of the C-H bond. Transition metal oxide as VO_x, Mo_x, FeO_x or CuO_x are considered to be the most effective for methane activation [1]. Recently, $CuFe_2(P_2O_7)_2$ catalysts have shown promising results for the selective oxidation of methane to formaldehyde and methanol [2].

The presented study refers exotemplated Cu-Fe-P-O catalyst for selective alkane oxidation with nitrous oxide at atmospheric pressure and temperatures of 420 - 630°C. Methane was used as a model reactant for the catalytic tests. The used structure directing agents, e.g. active carbon and/or maleic acid, ammonium carbonate, glycine and triethylene glycol, changed the crystalline structure and acidity of the catalysts. The best result was achieved over the catalyst modified with glycine at 600°C, where at 3.4% methane conversion the selectivity of useful oxygenates 44.6% was observed.

This work was supported by the Slovak Grant Agency Vega No.1/0556/13.

[1] C.Hamond, S. Conrad, I. Hermans: ChemSusChem., (2012)
[2] R. Polnišer, M. Štolcová, M. Hronec, M. Mikula: Applied Catalysis A: General, (2011)

6P11
MECHANISMUS POVRCHOVÝCH REAKCÍ PROBÍHAJÍCÍCH PŘI HYDROGENACI NITRILŮ NA KOVOVÝCH KATALYZÁTORECH

Jiří Krupka

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, ČR, jiri.krupka@vscht.cz

Heterogenně katalyzovaná hydrogenace nitrilů se uplatňuje při výrobě mnoha aminů z kategorie chemických specialit, farmaceutických meziproduktů nebo základních průmyslových chemikálií. V závislosti na zvoleném katalyzátoru a reakčních podmínkách může v produktu hydrogenace převažovat amin primární, sekundární nebo terciární. Ačkoliv reakční schéma vzniku primárního, sekundárního a terciárního aminu je dobře známo (chemismus von Brauna a Greenfielda [1]), detailní mechanismus reakcí probíhajících na povrchu hydrogenačního katalyzátoru při jejich tvorbě je stále ještě předmětem mnoha spekulací. To je dáno tím, že doposud nejsou k dispozici fyzikálně-chemické studie, na jejichž základě by bylo možné intimní reakční mechanismus povrchových reakcí jednoznačně potvrdit přímým způsobem. Z detailního rozboru dosavadních poznatků o reakcích aminů na povrchu kovových katalyzátorů a z výsledků našich kinetických studií však vyplývá, že na vzniku sekundárních a terciárních aminů hydrogenací nitrilů se může podílet vedle enaminového mechanismu, také tzv. aminokarbenový mechanismus [2]. Ten předpokládá, že nenasycené meziprodukty tvorby sekundárního a terciárního aminu, jmenovitě sekundární imin a enamin, mohou existovat na povrchu kovového katalyzátoru též ve formě povrchových aminokarbenů.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č.20/2013.

[1] Greenfield H (1967). Ind Eng Chem Prod Res Dev 6:142
[2] Krupka J, Pašek J (2012). Curr Org Chem 16:988

6P12
OPTIMALIZACE PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S KATEXOVOU MEMBRÁNOU

Karel Vazač, Martin Paidar, Martin Roubalík, Karel Bouzek

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, vazack@vscht.cz

Vodík je v současnosti vyráběn převážně z fosilních paliv pomocí procesů, jako jsou parní reforming, či parciální oxidace. Elektrolýza vody tak zabezpečuje pouze necelých 5 % světové produkce. Klíčový problém představují provozní náklady elektrochemického procesu. Elektrolýza vody však má rovněž řadu pozitiv. Patří mezi ně zejména skutečnost, že se jedná o jednokrokový proces, ve kterém kyslík představuje jediný vedlejší produkt. Vyrobený vodík rovněž dosahuje velmi vysoké čistoty. Vstupní surovinou je voda, která je dostupná v prakticky neomezeném množství. Je však zřejmé, že k dosažení výraznějšího praktického rozšíření tohoto procesu je nezbytné zvýšit jeho účinnost a tím snížit provozní náklady.

V případě alkalické varianty elektrolýzy, která představuje dnes v podstatě jedinou průmyslově rozšířenou technologii elektrolýzy vody, se nabízí nahrazení masivní anorganické diafragmy polymerní membránou plnící roli pevného elektrolytu. Vedle anion selektivních membrán charakterizovaných nízkou tepelnou stabilitou funkčních skupin, nabízí zajímavou alternativu homogenní perfluorované kation selektivní membrány. Ty díky své vysoké chemické a mechanické stabilitě umožňují použít velice malou tloušťku membrán a pracovat za zvýšené provozní teploty. Další výhodu představuje možnost použití tzv. „zero-gap“ uspořádání. Alkalické prostředí pak umožňuje pracovat bez použití platinových katalyzátorů. Tyto skutečnosti kompenzují nevýhody spojené především s relativně pomalým transportem draselných iontů membránou.

Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu (projekt FR-TI4/384).

6P13
ELEKTROCHEMICKÁ SYNTÉZA ŽELEZANU S VYUŽITÍM INERTNÍ ANODY

Martin Prokop[1], Tomáš Bystroň[1], Karel Bouzek[1]

[1]Ústav anorganické technologie VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, prokopm@vscht.cz

Železan draselný je fialová krystalická látka s velmi silnými oxidačními účinky. Produkty jeho redukce jsou netoxické. Vzhledem k politice trvale udržitelného rozvoje se železan draselný dostal v dnešní době do popředí zájmu řady výzkumných týmů. Jeho výjimečné vlastnosti ho předurčují k využití zejména v oblasti čištění odpadních vod, purifikace plynů, organických syntéz a v energetice.

Železan je dnes dostupný pouze v laboratorním měřítku. Vyráběn je převážně chemickou cestou ve vodném roztoku. Tento přístup přináší problémy se zpracováním roztoků odpadajících při syntéze a se separací produktu o dostatečné čistotě. Vzhledem k těmto skutečnostem je dnes cena železanu příliš vysoká pro průmyslové uplatnění. Řešením může být anodická elektrochemická syntéza této látky, realizovaná v alkalické suspenzi železitých sloučenin. Výhodou tohoto procesu je možnost využití odpadních materiálů s odpovídajícím obsahem železa a tím i snížení ceny vyrobeného železanu. Proces lze také provozovat kontinuálně.

Cílem této práce bylo porovnat vybranné materiály anody z hlediska vhodnosti pro syntézu železanu z modelové suspenze hydroxidu železitého a určit optimální pracovní teplotu a složení elektrolytu pro syntézu. K tomuto účelu byla využita cyklická voltametrie na rotační diskové elektrodě. Materiály byly porovnány na základě dosahované proudové hustoty odpovídající tvorbě železanu.

Tato práce vznikla za finanční podpory MPO ČR v rámci projektu č.: FR-T14/363.

6P14
STUDIUM ROVNOMĚRNOSTI DISTRIBUCE ELEKTRICKÉHO PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE

Michal Němeček[1], Roman Kodým[1], David Tvrzník[2], Karel Bouzek[1], Dalimil Šnita[3]

[1]VŠCHT Praha, Ústav anorganické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika, nemecekm@vscht.cz
[2]MemBrain s.r.o., Pod Vinicí 87, 471 27 Stráž pod Ralskem, david.tvrznik@membrain.cz
[3]VŠCHT Praha, Ústav chemického inženýrství, Technická 3, 166 28 Praha 6 - Dejvice, Česká republika,

Elektrodialýza (ED) představuje elektro–membránový separační proces umožňující odstranění disociované soli z roztoku s využitím rozdílné permselektivity iontově selektivních membrán. Hnací silou tohoto separačního procesu je elektrické pole. Současný vývoj ED aparátu se ubírá především cestou maximalizace výkonu se současným snížením investičních nákladů. Toho lze docílit například zvyšováním počtu membránových párů nebo aktivní plochy membrán, či zmenšením plochy poplatinovaných titanových elektrod. Zmíněné konstrukční úpravy však mohou vést k nerovnoměrnému rozložení elektrického proudu a hmoty, a tím ke snížení spolehlivosti a životnosti zařízení [1,2,3].

V rámci této práce je studována rovnoměrnost distribuce proudu v pilotní ED jednotce sestávající z 200 vertikálně orientovaných membránových párů o celkové ploše membrán 151 m^2. Za tímto účelem jsou elektrody v tomto aparátu horizontálně rozděleny na šest elektricky izolovaných segmentů ve směru hlavního toku elektrolytu. Geometrie elektrod je pozměňována různou kombinací zapojení jednotlivých segmentů a to v širokém rozmezí provozních podmínek: koncentrace Na_2SO_4 v rozsahu 1–10 g dm^{-3}, v napěťovém rozsahu 0–300 V a v intervalu průtoků zpracovávaných roztoků 6 000–10 000 dm^3 h^{-1}. Výsledky experimentů potvrzují výrazné nerovnoměrnosti v distribuci elektrického proudu a zároveň ukazují na možnost snížení plochy elektrod až o 40 % s poklesem výkonu nejvýše o 4 %.

Financováno v rámci účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č. projektu A2_FCHT_2013_077 a projektu MPO TIP č. FR-TI1/479.

[1] Kodým R, Pánek P, Tvrzník D, Šnita D, Bouzek K: Macrohomogeneous approach to the two-

dimensional mathematical model of an industrial scale electrodialysis unit, J Appl Electrochem, 42 (2012) 645-666.
[2] R. Kodým, F. Vlasák, D. Šnita, A. Černín, K. Bouzek: Spatially two-dimensional mathematical model of the flow hydrodynamics in a channel filled with a net-like spacer, J Mem Sci, 368 (2011) 171-183
[3] Roman Kodým, Michal Němeček, Petr Pánek, Jiří Kratochvíla, Dalimil Šnita, Karel Bouzek, Závěrečná zpráva projektu ENERGETIKA č. FR-TI1/479 v r. 2013.

6P15
VLIV VYBRANÝCH PARAMETRŮ NA IONTOVOU VODIVOST YSZ ELEKTROLYTU

Filip Karas[1*], Martin Paidar[1], Karel Bouzek[1]

[1]Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28 Česká republika
**E-mail: karasf@vscht.cz*

Vysokoteplotní elektrolýza vody a vysokoteplotní palivové články s elektrolytem na bázi oxidické keramiky představují velmi slibné technologie výroby a zpětné konverze vodíku jako nosiče energie. Jejich atraktivita spočívá především ve vysoké účinnosti a intenzitě procesu, které jsou způsobeny zejména rychlou kinetikou elektrodových reakcí při provozní teplotě pohybující se okolo 800°C.

Jednou z nejdůležitějších součástí článků je pevný elektrolyt, nejčastěji ZrO_2 dopovaný Y_2O_3 (YSZ). Vlastnosti elektrolytu výrazně ovlivňují výkon celého elektrolyzéru/palivového článku. Mezi jeho nejdůležitější vlastnosti patří: vysoká iontová vodivost, plynotěsnost, dobrá chemická kompatibilita a koeficient tepelné roztažnosti shodný s ostatními komponenty článku. Proto se tato práce zaměřila na studium vlivu vybraných parametrů při přípravě YSZ elektrolytu na jeho iontovou vodivost.

Elektrolyt byl připraven ve formě tablet pomocí uniaxiálního lisování prekurzoru s následným slinováním. Byl sledován vliv tlaku, teploty a času slinování použitých při přípravě tablet elektrolytu na jeho iontovou vodivost. Hodnoty iontové vodivosti tablet byly měřeny pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie. Morfologie připravených tablet byla studována pomocí rastrovacího elektronového mikroskopu.

Z výsledků studie plyne, že významný vliv na iontovou vodivost měly zejména teplota a čas slinování. Vyšší teplota, popřípadě doba slinování vede ke vzniku větších zrn, což negativně ovlivňuje vodivost výsledného materiálu.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Technologické Agentury České republiky v rámci projektu č. TA01020930.

6P16
VLIV KAPALNÉHO ELEKTROLYTU NA PROVOZNÍ VLASTNOSTI ANION SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO ELEKTROLYTU V PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY

Jaromír Hnát[1], Martin Paidar[1], Jan Schauer[2], Karel Bouzek[1]

[1]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze,Technická 6,166 28 Praha, jaromir.hnat@vscht.cz
[2]Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského náměstí 1888/2,162 00 Praha

Vodík představuje efektivní energetický vektor se značným uplatnění v budoucím zásobování společnosti elektrickou energií. Aby mohly být plně využity jeho výhody jako čistého energetického nosiče, je nezbytné vyrábět vodík s co nejvyšší efektivitou a způsobem nezatěžujícím životní prostředí. Tohoto cíle může být dosaženo prostřednictvím elektrolýzy vody v kombinaci s elektrickou energií pocházející z obnovitelných zdrojů. Tímto způsobem lze dosánout nejen produkce čistého vodíku, ale zároveň například stabilizace dodávek elektrické energie z obnovitelných zdrojů.

Alkalická elektrolýza vody představuje průmyslově vužívaný proces, který však nebyl po několik dekád významněji rozvíjen. Jako kapalný elektrolyt je dnes používán obvykle 30 hm.% roztok KOH a jako separátor elektrodových prostorů anorganická diafragma. Významného zvýšení účinnosti alkalické elektrolýzy vody může být dosaženo nahrazením této diafragmy polymerní anion selektivní membránou. Většina dostupných materiálů však při teplotách přesahujících 70 °C podléhá v přítomnosti OH^- iontů degradaci. Možné řešení tohoto problému představuje nahrazení roztoku hydroxidu draselného uhličitanem nebo hydrogen–uhličitanem.

Cílem této práce tedy bylo posoudit vliv záměny 1 mol dm^{-3} KOH jako elektrolytu roztokem 1 mol dm^{-3} $NaHCO_3$, popř. 0,5 mol dm^{-3} Na_2CO_3 na vlastnosti a stabilitu polymerní anion selektivní membrány v průběhu alkalické elektrolýzy vody.

Poděkování: Tato práce vznikla za finanční podpory Technologické agentury České republiky v rámci projektu č. TA03010594.

6P17
AKTIVITY ČESKÉ ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY

Petra Šulcová, Jiří Málek

Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR, petra.sulcova@upce.cz

Odborná skupina termické analýzy (OSTA) při České společnosti chemické je aktivní od roku 1972. Národní skupina je od svého vzniku členem celosvětově působící odborné společnosti International Confederation for Thermal Analysis and Calorimetry, která je asociovaná s IUPAC. Odborná skupina organizuje semináře, které jsou zaměřeny na teoretické základy a přístrojovou techniku pro termickou analýzu.

V roce 2013 česká odborná skupina organizačně zajišťovala čtvrtý ročník společné termoanalytické konference čtyř států, a to Česka, Maďarska, Polska a Slovenska. Jednalo se o 4th Joint Czech-Hungarian-Polish-Slovak Thermo–analytical Conference, jejímž hostitelem byla Fakulta chemicko-technologická Univerzity Pardubice. První společné setkání termoanalytiků ze „čtyř států“ uspořádala maďarská skupina v květnu 2007 (Sopron), druhý ročník byl organizován v roce 2009 v Zakopaném (Polsko) pod záštitou „Polish Society of Calorimetry and Thermal Analysis“. V roce 2011 se uskutečnil 3. ročník společné česko-maďarsko-polsko-slovenské termoanalytické konference, kdy organizátorem byla „Pracovní skupinou pro termickou analýzu a kalorimetrii na Slovensku“.

Aktuální informace o odborné skupině jsou na: www.vscht.cz/ach/osta.

Autoři příspěvku děkují za finanční podporu MŠMT (projekt LG11027 realizující program INGO II).

6P18
IZOLACE THALLIA A JEHO SLOUČENIN Z ODPADNÍCH VOD

Ladislav Kudrlička[1], Jiřina Čežíková[1] Petr Pistulka[2], Vladimír Plucha[2], Martin Paidar[3],

[1]*Výzkumný ústav anorganické chemie, a.s., Revoluční 84, 400 01 Ústí nad Labem, ladislav.kudrlicka@vuanch.cz*
[2]*Kovohutě Příbram nástupnická, a.s., Příbram VI č.p. 530, 261 81 Příbram, pistulka@kovopb.cz*
[3]*Vysoká škola chemicko-technologická, FCHT, ÚAT, Technická 1905, 166 28 Praha, martin.paidar@vscht.cz*

Tato práce ukazuje možnost získávání čistého kovu a jeho sloučenin z polymetalických separátů po dekontaminaci odpadních vod (OV).

Při zpracování pevných emisí z výroby surového olova vznikají chlorido-síranové OV s vysokým obsahem rozpuštěných anorganických solí, mírně alkalickou reakcí pH a dominantním obsahem iontů toxických těžkých kovů, kadmia a thallia, kolísajícím v řádu desítek až stovek mg/l 0. K dekontaminaci OV byla použita redukce iontů těžkých kovů kovovým zinkem **Error! Reference source not found.**. V průběhu procesu vznikají polymetalické separáty, obsahující majoritně kadmium, zinek, thallium a olovo a široké spektrum jejich sloučenin.

Ze vzniklých separátů bylo izolováno thallium. V první fázi izolace byl rozkladem separátů pomocí H_2SO_4 a srážením HCl získáván TlCl znečištěný kadmiem, jehož byl zbavován hydrolytickým rozkladem přítomných podvojných solí. Z přečištěného TlCl byl rozkladem H_2SO_4 a následnou krystalizací připravován čistý Tl_2SO_4, sloužící jako výchozí látka pro přípravu čistých thallných sloučenin.

Při preparaci čistého kovu bylo thallium nejprve získáváno elektrochemickým vylučováním na grafitové katodě 0 z roztoků čistého síranu thallného ve formě zhutnělých shluků metalických dendritů. Takto vyloučené shluky metalických dendritů byly zformovány do hrudek a taveny v mírně redukční atmosféře v grafitovém kelímku při teplotách cca 500 °C. Vzorky kovového thallia byly připravovány sléváním roztaveného kovu do litinových formiček.

Tato práce vznikla s finanční podporou Ministerstva průmyslu a obchodu ČR při řešení programu ev. č. FR-TI3/187 v programu TIP.

[1] KUDRLIČKA, Ladislav et al. VÝZKUMNÝ ÚSTAV ANORGANICKÉ CHEMIE, A.S., ÚSTÍ NAD LABEM. *Způsob odstraňování thallia, případně thallia a kadmia, z kontaminované vody*

zinkem [patent]. C 02 F 1/38, C 02 F 1/62, C 02 F 103/16. Česká republika. Patent, 303308. Uděleno 2012-06-13. Zapsáno 2012-07-25. Dostupné z: http://www.upv.cz/

[2] KUDRLIČKA, L., KOVAČOVÁ, PISTULKA P., PLUCHA V.: *Separace těžkých kovů z odpadních vod v Kovohutích Příbram redukčně sorpčním způsobem*. 63. Zjazd chemikov, 5. – 9. 9. 2011, Tatranské Matliare. In: ChemZi 7/13 2011, s. 133. ISSN 1336-7242.

[3] PAIDAR, M. *Návrh elektrolytického stupně v technologii výroby thallia.* Výzkumná zpráva VŠCHT. Praha: VŠCHT, 2011.

6P19
IN-SITU CHARAKTERIZACE KYSLÍKOVÝCH SENZORŮ V PROSTŘEDÍ EUTEKTIKA PbBi

Jan Vít[1], Lukáš Košek[1], Fosca Di Gabriele[1]

[1]*Centrum výzkumu Řež s.r.o., Husinec - Řež, čp. 130, 250 68 Řež, www.cvrez.cz*

V současnosti jsou rozpracovány různé koncepty pokročilých jaderných reaktorů IV. generace. Jedním z nich je reaktor chlazený tekutým těžkými kovem, eutektickou slitinou PbBi. Studium chemické interakce PbBi s materiály okruhu reaktoru je důležitou oblastí ve vývoji reaktoru s tímto chladivem.

Chladivo PbBi dosahuje v reaktoru teplot vyšších než 500 °C a je klíčové zajistit ochranu před korozí i při těchto podmínkách. Jedním z řešení je dávkování určitého množství kyslíku do chladiva, které ovšem nesmí překročit mez rozpustnosti kyslíku v eutektiku. To by vedlo k tvorbě nerozpustných oxidů a zanášení okruhu. Pro efektivní dávkování kyslíku je nutné jeho koncentraci v eutektiku monitorovat. To umožňují kyslíkové senzory speciálně určené pro kapalné těžké kovy.

Cílem této práce bylo ověřit proveditelnost in-situ monitorování stavu kyslíkového senzoru pomocí elektrochemické impedanční spektroskopie (EIS). Tato metoda byla aplikována na senzory s referenčním systémem Bi/Bi_2O_3 a pevným elektrolytem na bázi ZrO_2 v eutektiku PbBi za podmínek typických pro chladivo.

Pro toto konkrétní použití ukázaly EIS spektra jasnou závislost signálu na teplotě a obsahu kyslíku. Výsledky *v* čase též umožnily posoudit stav jednotlivých senzorů, kde kvalita signálu senzoru korelovala s trendy vyditelnými na EIS spektrech.

Tato práce vznikla za finanční podpory projektu SUSEN CZ.1.05/2.1.00/03.0108, který je realizován v rámci Evropského fondu regionálního rozvoje (ERDF).

POSTERY - SEKCIA 1
ANALYTICKÁ A FYZIKÁLNA CHÉMIA

1Po01
VYUŽITIE NEIÓNOVÉHO TENZIDU TRITONU X-114 NA EXTRAKCIU A SKONCENTROVANIE STOPOVÝCH MNOŽSTIEV MEDI

Simona ČURMOVÁ, Lenka OKENICOVÁ a Radoslav HALKO

Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave, Mlynská dolina 4, CH2-312, 842 15 Bratislava, Slovenska republika, curmova@fns.uniba.sk

Extrakcia s využitím teploty zákalu micelárnych roztokov je v súčasnosti jednoduchá, citlivá, finančne nenáročná, rýchla technika skoncentrovania a extrakcie stopových množstiev iónov kovov zo vzorky. Túto metódu sme úspešne využili na stanovenie stopových množstiev medi v ľudskom moči metódou atómovej absorpčnej spektrometrie s plameňovou atomizáciou. Základom experimentu bola reakcia Cu(I) so selektívnym chelátotvorným činidlom – 2,9-dimetyl-1,10 fenantrolínom (neokuproínom) za vzniku žlto-oranžového chelátu. Stabilný, hydrofóbny chelát sme následne extrahovali do micelárneho roztoku neiónového tenzidu Tritonu X-114. V priebehu optimalizácie sme sa zamerali na štúdium viacerých experimentálnych parametrov ako boli vplyv pH extrakčného prostredia, koncentrácie chelátotvorného činidla, neiónového tenzidu, extrakčnej teploty a času trvania extrakcie. Linearitu systému sme testovali v rozmedzí koncentrácii 1,0-5,0 $mg \cdot L^{-1}$. Pri 20-násobnom skoncentrovaní medi v ľudskom moči sme dosiahli medzu detekcie LOD = 0,042 $mg \cdot L^{-1}$ a charakteristickú koncentráciu 0,009. Získané

extrakčné výťažky sa pohybovali v rozmedzí 68-83%.

Kľúčové slová: *meď; neokuproín; extrakcia; Triton X-114; atómová absorpčná spektrometria s plameňovou atomizáciou*

Poďakovanie: Táto práca vznikla za finančnej podpory grantovej agentúry MŠ SR VEGA, grant č. 1/0852/13, Grantu UK č. UK/308/2013 a Agentúry na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0583-11 pod záštitou centra excelencie VVCE-0070-07.

1Po02
INFLUENCE OF SURFACTANT STRUCTURE ON BIODEGRADATION

Anna Dabrowska[1]

[1]Department of Interfacial Phenomena, Faculty of Chemistry,Maria Curie-Sklodowska University, M. Curie-Sklodowska Sq. 3, 20-031 Lublin, Poland, adabrowska90@o2.pl

The rapid development of surfactants production and application accompanies increase of their concentration in the sewage. They are component of both urban and industrial pollutions and can be one of pollution indicator with constant upward tendency.

There are a lot of new results concerning the biological activity and environmental fate of surfactants. The biggest part of of researches on surfactant compounds removal from wastewater relates mainly the problem of their biochemical decomposition and the sorption of these substances by sewage sludges as well [1].

Achievement of compound ideal degradation is not always possible. It is often the lon-term process. Usually, can be observed partial biodegradation, with many intermediate products of different toxicity to environmentas a result. The response to the problem of clean and pure decomposition seems to be the group of sugar ester surfactants [2]. Unfortunately, not all of compounds from mentioned group have properties that allow for their widespread application. Further, the relationship between the structure of surfactant and its environmental impact is still not clearly defined. It is known that variations in head group size ir in alkyl chains lenght and number do not significantly affects biodegrability. Contrary, susbtitution of some specific groups have a significant influence on its degradation.

The main aim of this paper is to compare the stability of several selected surfactants with different structures and influence of sugar surfactants group on the environment.

[1] T. Cserhati, E. Forgacs, G. Oros; Environmental International, 2002, Vol. 28, Issue 5, p. 337-348

[2] I.J.A. Baker, B. Matthews, H. Suares, I. Krodkiewska, D.N. Furlong, F. Grieser, C.I. Drummond; Journal of Surfactants and Detergents, 2000, Vol. 3, Issue 1, p. 1-11

1Po03
BASE VOLTAMMETRIC CHARACTERIZATION OF PHENYLAZIDE MODIFIED DEOXYCYTIDINE – THE POTENTIAL DNA REDOX LABEL ENABLING ITS POST-SYNTHETIC MODIFICATIONS BY „CLICK-REACTIONS“

Aleš Daňhel[1], Zuzana Trošanová[1], Jana Balintová[2], Luděk Havran[1], Michal Hocek[2], Miroslav Fojta[1]

[1] Institute of Biophysics, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Kralovopolska 135, CZ-61265 Brno, Czech Republic, danhel@ibp.cz
[2] Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Flemingovo nam. 2, CZ-16610 Prague 6, Czech Republic

DNA redox labels may significantly improve selectivity and sensitivity of the biosensors and bioassays, and expand the palette of applicable electrode materials in sensing of nucleic acid [1]. Their applications including DNA hybridization, primer extension, PCR, SNP typing, DNA damage and/or DNA-protein interaction could found potential use in medicine, biology or toxicology [2].

This work concerns with voltammetric behaviour of prospective DNA redox label: 5-(4-azidophenyl)-2´-deoxycytidine (dC^{PA}, Fig. 1) using cyclic voltammetry (CV) at hanging mercury drop electrode (HMDE). The phenylazide may be after an incorporation of the dC^{PA}-triphosphate into the DNA modified by oter optinal moieties bearing ethynyl or nitrile groups using “Click-reaction” [3]. An influence of electrolyte pH (Britton-Robbinson buffer, BR) on recorded CVs of dC^{PA} was observed in the pH range 2-12. Appearance of dC^{PA} redox signals is influenced by the pH and it increases its signal response diversity. Adsorption directed electrode reduction of dC^{PA} was confirmed within scan rates 0.02 – 10.0 Vs^{-1}, and submicromolar limits of detection were achieved by CV at HMDE both in BR buffer pH 4, 5, 6 and 7. Enyzmatic

incorporation into a DNA and its electrochemical properties will be the scope of further studies.

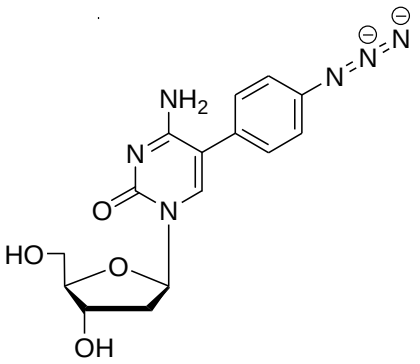


Fig. 1 Structure formula of 5-(4-azidophenyl)-2´-deoxycytidine (dC^{PA})

Financial support from project OPVK CZ.1.07/2.3.00/30.0019, The Czech Science Foundation GACR (project P206/12/G151), and GA ASCR (IAA400040901) is gratefully acknowledged.

[1] Fojta M., Havran L., Pivonkova H., Horakova P., Hocek M.: Curr. Org. Chem. *15*, 2936 (2011).
[2] Hocek M., Fojta M.: Chem. Soc. Rev. *40*, 5802 (2011).
[3] El-Sagheer A. H., Brown T.: Chem. Soc. Rev. *39*, 1388 (2010).

1Po04
VOLTAMPÉROMETRICKÉ ŠTÚDIUM PD/C KATALYZÁTORA PRE HYDROGENÁCIE V KVAPALNEJ FÁZE

Silvia Demčáková[1], Mária Heželová[1], Ľubomír Pikna[1]

[1] *Katedra chémie, Hutnícka fakulta, Technická univerzita v Košiciach, Letná 9, 042 00 Košice, silvia.demcakova@tuke.sk*

V súčasnosti je katalýza nevyhnutná pre rôzne energetické premeny, chemickú výrobu a environmentálne technológie. Zo všetkých katalyzovaných chemických reakcií, až 80% predstavuje heterogénnu katalýzu. Pre priemyselné využitie heterogénnych katalyzá–torov zohráva kľúčovú úlohu vysoký pomer povrchu a objemu [1].

Paládium vďaka svojim výborným fyzikálno-chemickým vlastnostiam, predstavuje najviac používaný kov v rôznych typoch heterogénnych katalytických reakciách. Rýchly progres v príprave a použití paládiových nosičových katalyzátorov vyžaduje permanentné vylepšenia v charakterizácii týchto materiálov. Elektro–chemické metódy predstavujú alternatívny prístup ich charakterizácie [2, 3].

V tejto práci sú zhrnuté výsledky štúdia elektrochemického správania sa paládiového katalyzátora na aktívnom uhlí (1-10 % Pd), ktorý bol pripravený jednoduchou redukciou z prekurzora Na_2PdCl_4. Na charakterizáciu pripravených katalyzátorov Pd/C bola použitá cyklická voltampérometria s využitím tuhej pracovnej elektródy (parafínom impregnovanej grafitovej elektródy - PIGE). Po dispergovaní katalyzátora v redestilovanej vode, etanole a Nafione v ultrazvukovom kúpeli sa zmes naniesla na povrch PIGE. Voltampérometrické správanie v zásaditom (0.1 mol dm^{-3} NaOH) a kyslom (0.5 mol dm^{-3} H_2SO_4) prostredí boli vyhodnotené a navzájom porovnané. Získané voltampérogramy odpovedali elektrochemickým procesom prebiehajúcim na povrchu Pd.

Táto práca vznikla za podpory Agentúry Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu pre štrukturálne fondy EÚ, projekt: „Hydrogenácie v kvapalnej fáze“, ITMS kód projektu: 26220220144.

[1] Willocq C., Dubois V., Khimyak Y.Z, Devillers M., Hermans S.: Hydrogenation of nitrobenzene over Pd/C catalysts prepared from molecular carbonyl–phosphine palladium clusters, Journal of Molecular Catalysis A: Chemical 365, 2012, 172–180
[2] Tokarev A.V., Kustov L.M., Ivaska A., Murzin D.Y.: Cyclic voltammetry as a tool for characterization of supported VIII group metal catalysts, Applied Catalysis A: General 309, 2006, 52–61
[3] Liu Z., Zhang X., Hong L. : Physical and electrochemical characterizations of nanostructured Pd/C and PdNi/C catalysts for methanol oxidation, Electrochemistry Communications 11, 2009, 925–928

1Po05
QCM – JEDNODUCHÝ NÁSTROJ PRE DETEKCIU A SLEDOVANIE KONFORMAČNÝCH ZMIEN BIOMOLEKÚL NA PEVNÝCH POVRCHOCH

Viktor Gajdoš[1], Ján Labuda[1]

[1] *Ústav analytickej chémie, Fakuta chemickej a potravinárskej technológie STU v Bratislave, Radlinského 9, 81215 Bratislava, viktor.gajdos@stuba.sk*

QCM (Quartz Crystal Microbalance) je jedna z metód pre štúdium vlastností a molekulárnych interakcií v biovrstiev na pevnom povrchu a detekciu signálu biosenzorov bez potreby použitia značiek. V porovnaní s ostatnými metódami štúdia tenkých vrstiev (elipsometria, SPR, DPI, AFM a i.), je jej výhodou pomerne nízka cena, ale tiež širšie spektrum informácií,

ktoré je možné pomocou vyspelých aparatúr na báze QCM získať. Okrem vysokej citlivosti na zmenu hmotnosti naviazaných vrstiev pri afinitných interakciách, umožňuje monitorovať aj viskoelestické, či hydrofóbno/filné vlastnosti komplexných biovrstiev viazaných na povrchu kryštálu, čo umožňuje rozoznať aj zmeny konformácie či poškodenie biomolekúl. [1]

V oblasti analytickej a bioanalytickej chémie sa na báze QCM vyvíjajú metódy pre detekciu plynov, pár, malých molekúl, interakcií protilátok, bielkovín, DNA, ale aj živých buniek na pevných povrchoch ako aj ich metabolickej aktivity. Okrem štúdia afinitných interakcií je sľubná tiež detekcia interakcií materiálov na báze MIP, či hodnotenie poškodenia DNA chemickými látkami [2].

Pre lepšiu citlivosť a interpretáciu signálu pri QCM meraní, najmä rozoznanie príspevkov od zmeny hmotnosti a zmeny viskoeleastických vlastností pri komplexnejších biovrstvách, boli vyvinuté viaceré modely pre vyhodnocovanie získaných dát a typy meracích aparatúr na báze QCM.

Cieľom príspevku je stručný súhrn aktuálneho stavu a možností metód QCM pre využitie v analytickej chémii a osobitne pri detekcii pomocou biosenzorov.

Poďakovanie. Práca vznikla za podpory od Vedeckej Grantovej Agentúry MŠ SR v rámci projektu VEGA č. 1/0182/11.

[1] G. N. M. Ferreira, A. C. da Silva, B. Tomé: Trends in Biotech.; (2009), 27 (12), 689-697
[2] R. E. Speight, M. A. Cooper: J. Mol. Recognit.; (2012); 25, 451-473

1Po06

FOURIER - TRANSFORM ANALYSIS OF CW-EPR SPECTRUM OF COPPER(II)-HISTIDINE (1:2) COMPLEX IN MOBILE PHASE. DISCRIMINATION OF NITROGEN SUPERHYPERFINE COUPLING CONSTANTS.

Lukáš Gaľa[1], Marián Valko[1]

[1]*Slovak University of Technology in Bratislava, Faculty of Chemical and Food Technology, Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Department of Physical Chemistry, SK-81237 Bratislava, Slovakia, lukas.gala19@gmail.com*

Resolution of superhyperfine (shf) structure in EPR spectra due to the magnetically active nuclei of donor atoms in metal complexes provide valuable information about the nature of metal-ligand bonding.[1] Superhyperfine coupling constants can be determined by either direct inspection of the spectra or by computer simulation of experimental data. Complications in discrimination of number of bonded nitrogens arise when superhyperfine pattern consists of more lines than are resolved or assignment of multiplets is not straightforward. This was clearly demonstrated in fluid EPR spectrum of copper(II)-L-histidine (1:2) complex.[2] The high field copper band shows relatively clearly resolved nine lines suggesting an existence of four nitrogens bonded to copper (histamine-like structure). However, detail inspection of this band reveals a slight asymmetry of the spectral line shape and lead to the assignment of another seven line multiplet. This would confirm an existence of species with three directly bonded nitrogens to copper (glycine-like structure). Here we present a simple method based on Fourier Transform (FT) analysis of EPR spectra for a straighforward interpretation of superhyperfine structure of biologically active copper(II)-histidine complex. This complex is of special interest sincehistidine is involved in the coordination of copper ions in several copper proteins, including superoxide dismutase, ceruloplasmin, ascorbate oxidase, etc.[3] In addition, histidine is thought to be involved in the transport of copper into cells in vivo, from one of the most abundant proteins, serum albumin.

[1] G.D. Lunga, R. Pogni, R. Basosi, J.Magn.Reson., 1995, 114, 174.
[2] J.L. Meyer, J.E. Bauman, J. Am. Chem. Soc. 1970, 92, 4210.
[3] H.J. McArdle, S.M. Gross, D.M. Danks, A.G. Wedd, Am. J. Physiol 1990, 258, G988.

1Po07

FLOW-MODULATED COMPREHENSIVE TWO-DIMENSIONAL GAS CHROMATOGRAPHY WITH SIMULTANEOUS FLAME IONIZATION AND QUADRUPOLE MASS SPECTROMETRIC DETECTION

Roman Gorovenko, Jan Krupcik, Ivan Spanik

Institute of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia
e-mail: romagorovenko@gmail.com

Flow-modulated comprehensive two-dimensional gas chromatography with simultaneous monitoring of the separation by flame ionization (GC×GC-FID) and quadrupole mass

spectrometric (GC×GC-qMSD) detection was studied for the analysis of gasoline and kerosene samples. The acquisition frequency of the FID was 100 Hz and of the qMSD 18 Hz for the mass range m/z 40 to 300. The instrumental set-up allowed both one-dimensional (GC-FID and GC-qMSD) and two-dimensional separations using the same working conditions. Gasoline and kerosene samples were analyzed on the column combination HP-5MS (^{1}D) + HP INNOWax (^{2}D). Three modulated peaks were obtained for each hydrocarbon present above 0.1% with ca. 300 ms peak width at the base using 6 s modulation time. Modulated peaks in GC×GC-FID were thus characterized by ca. 30 points while those in GC×GC-qMSD method by 6 to 8 points only. The FID acquisition speed is sufficient for reliable quantitative analysis, while the qMSD scan speed is perfectly appropriate for identification purposes. Moreover, in the GC×GC-qMSD method considerably improved quality of uncorrected spectra was obtained, arising from the enhanced separation over one-dimensional GC-MSD analysis. Spectral match qualities of up to 98% were found.

Acknowledgement: Authors acknowledge the Grant Agency of the Slovak Republic for a VEGA č. 1/0483/11 Grant.

1Po08
NANOŠTRUKTÚRY NA BÁZE TIOLOVANÝCH CYKLODEXTRÍNOV NA POVRCHU SKLA

Soňa Halászová[1], Monika Jerigová[2], Dušan Velič[3]

[1]*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15, Bratislava, sona.halaszova@gmail.com*
[2]*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 04 Bratislava*

Štúdium povrchových nanoštruktúr je dôležité z hľadiska ich využitia v priemysle, napr. nanoštruktúry sa používajú v oblasti výpočtovej techniky. Náš systém sa skladá z monotiolovaného β-cyklodextrínu ($C_{42}H_{70}O_{34}S$), ktorý je umiestnený na sklenom substráte. Sklený substrát je modifikovaný použitím 3-(trimetoxysilyl) propyl metakrylátu. Povrchové nanoštruktúry sa tvorili samousporiadavaním. Samousporiadané monovrstvy sú usporiadané vrstvy organických substrátov, ktoré sa formujú adsorbovaním molekúl z roztoku obsahujúceho povrchovoaktívne látky na povrch. V prvom kroku dochádza k difúziou riadenej Langmuirovej adsorpcii. Druhý krok možno popísať ako proces samorganizácie naadsorbovaných povrchovo–aktívnych látok na povrchu substátu. Monotiolovaný β-cyklodextrín sa skladá zo siedmich α-1, 4-D glukopyranózových jednotiek. Cyklodextríny boli vybrané zámerne, pretože dokážu tvoriť inklúzne komplexy a taktiež sú schopné vytvárať štruktúry podobné samousporiadaným monovrstvám. Na štúdium vzniku týchto povrchových nanoštruktúr sa používa hmotnostná spektrometria sekundárnych iónov. Princípom tejto techniky[1] je bombardovanie povrchu vzorky pulzným fokusovaným zväzkom primárnych iónov na báze tekutého kovu (Bi^+) s energiou 15 až 25 keV. Pomocou tejto techniky možno skúmať fragmentáciu monotiolovaného β-cyklodextrínu a prítomnosť samousporiadanej vrstvy na sklenom povrchu. V hmotnostných spektrách boli pozorované fragmenty $C_6H_{15}O_2Si^+$, $C_7H_7O_2Si^+$, $C_8H_9O_2Si^+$, $C_9H_{13}O_2Si^+$, $Si_2C_4H_{13}O^-$, $Si_2C_5H_{15}0^-$, $SiCH_3O_2^-$, $SiC_3H_5O^-$, $SiC_2H_7O_2^-$, C_3HSO^-, CH_3SiO^- a $SiC_4H_7SO^-$. Hlavným cieľom tohto projektu je podrobné štúdium a príprava povrchových nanoštruktúr pozostávajúcich z monotiolovaného β-cyklodextrínu, 3-(trimetoxysilyl) propyl metakrylátu a skleného substrátu.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE- Centrum excelentnosti kvantových technológií', APVV-0491-07, NanoNet2 a UK/461/2013.

[1] Vickermann, J.; Briggs, D.: ToF-SIMS: Surface Analysis by Mass Spectrometry. Surface Spectra Limited, Huddersfield, 2001. 75 – 113p. ISBN: 1-901019-03-9

1Po09
CHEMICKÁ IONIZACE ZA ATMOSFÉRICKÉHO TLAKU PŘI NÍZKÝCH PRŮTOCÍCH VZORKU

Ondřej Hejnar[1], Volodymyr Pauk[1], Andreea Maria Iordache[1], Karel Lemr[1]

[1]*Katedra analytické chemie, Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika*

Chemická ionizace za atmosférického tlaku (APCI) je, spolu s elektrosprejem (ESI), běžně dodávanou ionizační technikou pro spojení kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií. Komerční iontové zdroje umožňují

pracovat s vysokými průtoky mobilní fáze (vzorku) v jednotkách ml/min, omezením jsou nízké průtoky, kdy spodní mezí je obvykle průtok v desítkách až stovkách µl/min. Tato skutečnost omezuje použití chromatografických kolon s vnitřním průměrem 0,3mm a menším. Řešením jsou iontové zdroje speciálních konstrukcí [1]. Alternativou studovanou v této práci je vhodná úprava podmínek ionizace. S využitím komerčního zdroje APCI se vstupem pro LockSpray (ESCi zdroj, hmotnostní spektrometr Q-TOF Premier, Waters, Manchester, UK) byl zkoumán vliv řady parametrů. Především byly hledány vhodné průtoky zmlžovacího a desolvatačního plynu, jeho teplota, ověřování vhodné geometrie – poloha výbojové jehly. Přívod vzorku byl realizován vstupem LockSpray v rozmezí 1-10 µl/min. Významné zvýšení intenzity signálu bylo pozorováno při regulaci průtoku plynů a při vyklonění jehly APCI pod vstup do hmotnostního analyzátoru. Intenzita signálu pro průtok analytu 5 µl/min (methanolový roztok cholesterolu o koncentraci 15 µg/ml) je přibližně pouze o řád nižší než v případě ionizace téhož vzorku v klasickém APCI zdroji, ale při dvacetkrát větším průtoku (100 µl/min). Při aplikaci stejného vzorku průtokem 5 µl/min za užití klasického APCI byl signál cholesterolu prakticky na úrovni šumu.

OH a VP děkují za podporu Univerzitě Palackého v Olomouci (projekt PrF_2013_030), KL Grantové agentuře ČR (P206/12/1150) a A-MI Ministerstvu školství mládeže a tělovýchovy ČR – Operační program vzdělávání pro konkurenceschopnost-Evropský sociální fond (CZ.1.07/2.3.00/30.0004)

[1] Pekka Ostman, Seppo J. Marttila, Tapio Kotiaho, Sami Franssila, and Risto Kostiainen. Microchip Atmospheric Pressure Chemical Ionization Source for Mass Spectrometry. *Anal. Chem.*, **2004**, 76 (22), 6659-6664

1Po10

COVALENT BINDING OF CISPLATIN IMPAIRS THE FUNCTION OF NA^+/K^+-ATPASE BY BINDING TO ITS CYTOPLASMIC PART.

Miroslav Huličiak[1], Jan Vacek[2], Marek Šebela[3], Eva Orolinová[2], Joanna Znaleziona[2], Marika Havlíková[2], Martin Kubala[1]

[1] *Department of Biophysics, Palacky University in Olomouc, Czech Republic*
[2] *Department of Medical Chemistry and Biochemistry, Palacky University in Olomouc, Czech Republic*
[3] *Department of Biochemistry, Palacky University in Olomouc, Czech Republic*

Na^+/K^+-ATPase (sodium potassium pump) is a member of P-type ATPases which generates concentration gradients of sodium and potassium ions across the plasma membrane of all animal cells. This protein pumps three sodium ions out and two potassium ions into the cell for each ATP molecule and maintains their electrochemical potential gradients, required for electrical excitability and transport of other ions, nutrients, and neurotransmitters, as well as for regulation of cell volume and intracellular pH. Change of activity of this enzyme can influence these mechanisms and can potentially result in variety of diseases.

Cisplatin [cis-diamminedichloroplatinum(II)] is the most widely used chemotherapeutics in cancer treatment. The way that cisplatin operates is by forming a platinum complex inside of a cell which binds to DNA and impairs DNA replication and cell division. However, treatment by the cisplatin has many side-effects such as hearing loss, neuropathies and acute renal failure. Gradient of sodium ions is essential for the correct functioning of the kidneys. In contrast to many transporters that utilize the Na^+ gradient (and reduce it in this way), there is only one transporter that creates the gradient itself – the Na^+/K^+-ATPase.

We tried to verify the hypothesis, that acute renal failure during the treatment by the cisplatin can be caused by interaction of the cisplatin with the sodium potassium pump. According to our results on whole protein and on its large [C45] and small [C23] cytoplasmic loops, we can conclude that the cisplatin significantly inhibits activity of the sodium potassium pump. The next conclusion is that cisplatin binds to cysteine residues in the large cytoplasmic loop and the molecular mechanism of the inhibition might be related to cisplatin binding to Cys367 near the

phosphorylation site. Recently, we obtained first crystal structures of the sodium potassium pump with cisplatin which can help reveal direct binding sites on enzyme.

Acknowledgement
This work was supported by grant of Czech Ministry of Health NT11071-4/2012 , by Palacký University (PrF-0213-017) and by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic, grant No. CZ.1.07/2.3.00/20.0057

Huličiak M, et al. (2012) Covalent binding of cisplatin impairs the function of Na+/K+-ATPase by binding to its cytoplasmic part. Biochem Pharmacol 83(11), 1507-13

1Po11
STANOVENÍ Si VE VZORCÍCH ORGANICKÝCH PIGMENTŮ METODOU FL-AAS

Lenka Husáková[1], Iva Urbanová[1], Tomáš Faltys[1], Tomáš Kratochvíl[2], Vlasta Lišková[3], Jitka Šrámková[1]

[1]Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573 – HB/D, 532 10 Pardubice, Česká Republika, lenka.husakova@upce.cz
[2]Ústav environmentálního a chemického inženýrství,Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573 – HB/D, 532 10 Pardubice, Česká Republika
[3]Synthesia a.s., Semtín 103, 530 02 Pardubice, Česká Republika

Organické diketo-pyrolo-pyrolové (DPP) pigmenty vyráběné firmou Synthesia, a. s. (Pardubice, Česká Republika) nachází pro své jedinečné vlastnosti jako jsou výborná kryvost, stálost v organických rozpoustědlech či tepelná stabilita v praxi široké uplatnění. Jedná se např. o využití v barvení vysokomolekulárních látek, pro kvalitní průmyslové nátěrové hmoty, zejména originální automobilové laky, apod. Křemík, který se v podobě SiO_2 do pigmentu může dostávat v průběhu výroby při mletí z balotinových kuliček následně negativně ovlivňuje aplikační vlastnosti pigmentu. Zvýšený obsah křemíku ve vzorku je pak signálem k výměně mlecích kuliček. Za účelem monitorování obsahu Si v pigmentu v průběhu procesu výroby byla vyvinuta metoda využívající přímého dávkování suspenzí s následnou analýzou pomocí atomové absorpční spektrometrie s atomizací v plameni (FL-AAS). Metoda byla navržena jako časově úsporná alternativa k postupům založeným na mineralizaci na mokré cestě. Provedena byla optimalizace parametrů měření a postupu přípravy suspenze. Byl sledován vliv dispergačních a extrakčních činidel, ionizačních pufrů, navážky vzorku, velikosti částic, doby ultrazvukování suspenze a interference matrice na stanovení. Určeny byly analytické charakteristiky metody. Správnost postupu byla ověřena porovnáním výsledků získaných přímou analýzou suspenzí s daty obdrženými po mikrovlnné mineralizaci či extrakci a pomocí referenční metody LIBS (spektrometrie laserem indukovaného plazmatu).

Autoři děkují interní grantové agentuře Univerzity Pardubice, projekt č. SGFChT06/2013 za finanční podporu.

1Po12
STANOVENÍ MIDAZOLAMU V KRÁLIČÍ PLAZMĚ METODOU GC-NPD A HPLC-UV PO NAZÁLNÍ A KONJUNKTIVÁLNÍ APLIKACI

Martin Jaček[1], Jana Matějčková[1], Jiří Málek[2], Ladislav Hess[3], Eva Samcová[1]

[1]Ústav biochemie, buněčné a molekulární biologie, 3. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika
[2]Klinika anesteziologie a resuscitace, 3. Lékařská fakulta, Univerzita Karlova v Praze a Fakultní nemocnice Královské Vinohrady, Šrobárova 50, 100 34 Praha 10, Česká republika
[3]Institut Klinické a Experimentální Medicíny, Vídeňská 1958/9, 140 21 Praha 4, Česká republika
martin.jacek@volny.cz

Pro stanovení hladiny midazolamu v králičí plazmě po nazální a konjuktivální aplikaci byla použita metoda plynové chromatografie s dusíko-fosforovým detektorem (GC-NPD) a kapalinová chromatografie s UV detektorem. Příprava vzorku pro analýzu na GC-NPD byla založena na metodě používané pro stanovení fentanylu a sufentanilu[1,2]. Analyt byl extrahován pomocí extrakce kapaliny kapalinou ve třech krocích, a to extrakce směsí chlorbutan/isopropylalkohol v alkalickém prostředí, extrakce 1 M HCl a nakonec extrakce chlorbutanem z alkalického prostředí. Bylo prokázáno, že klíčovým bodem přípravy vzorku je doba ponechání MDZ v alkalickém prostředí před poslední extrakcí. Optimalizací tohoto postupu jsme dosáhli výtěžnosti 99,6%.

Pro HPLC-UV metodu byl vzorek připraven dvojnásobnou extrakcí hexanem z alkalizované plazmy[3].

Detekční limit GC-NPD metody byl 0,34 ng/ml, což je 10x méně než v případě HPLC-UV metody. Současně GC-NPD metoda potřebuje pro přípravu vzorku méně než poloviční množství krevní plazmy (200 μl). Vyšší čistota vzorku připraveného tímto postupem zároveň vede k prodloužení životnosti NPD detektoru.

Obě cesty aplikace anestetika (nazální a konjunktivální) vedou k porovnatelným hladinám midazolamu v plazmě. Z naměřených hodnot byla v závěru provedena kinetická simulace hladiny midazolamu pro oba typy aplikace.

Autoři děkují Jiřímu Doušovi (Mediware a.s.) za provedení farmakokinetické simulace a Zuzaně Šimůnkové (IKEM Praha) za odběry vzorků při experimentech.
Tato práce vznikla s podporou projektu IGA NT-11284-4-2010 a programu PRVOUK P31 Univerzity Karlovy v Praze.

[1] Choi, H. S., Shin, H. C., Kyany, G., Rhee, J. M., Lee, H. B., J. Chromatogr. B 2001, 765, 63-69.
[2] Laganière, S., Goernert, L., Gallicano, K., Otson, R., Clin. Chem. 1993, 39 (10), 2206-2207.
[3] Portier, E. J. G., de Blok, K., Butter, J. J., van Boxtel, C. J., J. Chromatogr. B 1999, 723, 313-318.

1Po13
ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL SKLENÝCH POVRCHOV A POVRCHOVÝCH ORGANICKÝCH NANOŠTRUKTÚR

Eduard Jáné[1], Daniel Repovský[1],Tibor Pálszegi[3], Dušan Velič[1,2]

[1]*Prírodovedecká fakulta UK, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie , Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovensko*
[2]*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava*
[3]*TheMatExp, Fedinova 22 ,85101 Bratislava, Slovensko*

Sklo patrí medzi najbežnejšie používané materiály. Jeho výhodou je inertnosť a pevnosť na druhej strane jeho nevýhodou je krehkosť. V našej práci sme sa zamerali na modifikáciu povrchu skla silánom a PVA-PVAc, ktoré ovplyvňuje mechanické vlastnosti skla. Na meranie pripravených povrchov bol použitý elektrokinetický analyzátor povrchov (Surpass). Medzi čistým skleným vláknom a silanizovaným nastáva mierna zmena v zeta potenciály približne 5mV v závislosti od zmeny pH. V prípade duvilaxových častíc je nárast hodnôt zeta potenciálu približne o 20 mV. Navyše pri čistom skle nastávajú dva zlomy v zeta potenciály pri pH 4 a 7.5, kým v sklených vláknach pokrytých silánom, alebo silánom a duvilaxom tento efekt nepozorujeme. Na základe nafitovaných výsledkov z Triple Layer modelu[1] môžeme usudzovať, že silán pokrýva funkčné skupiny na povrchu skla a nastáva mierny pokles funkčných skupín >Al-O-Si< na povrchu. Zo Soft Layer modelu[2] na druhej strane môžeme predpokladať, že pokrytie povrchu duvilaxovými sférami je približne 40%

Táto práca bola podporená grantmi ERDF OP R&D, meta-QUTE–Centrum excelentnosti kvantových technológií, APVV-0491-07 , VEGA 1/0522/10 a VEGA 1/0437/10, NanoNet2

[1] P. Leroy and A. Revil Journal of Colloid and Interface Science 270 (2004) 371–380
[2] J. F. L. Duval, D. Kuttner, C. Werner and R. Zimmermann, Langmuir 2011, 27, 10739–10752

1Po14
MEASUREMENT OF CLAY MINERALS BY THE VIBRATIONAL SPECTROSCOPY

Jana Josieková[1]

[1]*Department of Analytical Chemistry and Material Testing, VŠB - Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 33, Ostrava-Poruba, jana.josiekova@vsb.cz*

This paper deals with measurement of clay minerals using Raman spectroscopy and problems of fluorescence of clay minerals.

For analysis were used several types of clay minerals like: kaolinite, nontronite, montmorillonite, illite, muskovite and others. The text describes the techniques of sample preparation and various techniques of samples measuring.

This article will serve as a basis for further analysis of clay minerals.

1Po15
STANOVENÍ POMĚRU ENANTIOMERŮ L- A D-CYSTEINU POMOCÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA

Jakub Koktan[1], Pavel Řezanka[1], Pavel Matějka[2], Vladimír Král[1]

[1] Ústav analytické chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, Česká Republika, koktanj@vscht.cz
[2] Ústav fyzikální chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, Česká Republika

Tato práce se zabývá analytickým využitím nanočástic stříbra (~ 45 nm) k predikci enantiomerního složení L- a D-cysteinu. Nanočástice byly připraveny redukcí citronanem sodným ve vodě a poté postsynteticky modifikovány cysteinem. Tato modifikace měla za následek vytvoření opticky aktivních systémů, které bylo možné sledovat spektroskopicky v UV-Vis oblasti technikou elektronového cirkulárního dichroismu.

Naměřená spektra byla statisticky zpracována analýzou hlavních komponent a byl vytvořen multivariátní kalibrační model pomocí metody částečných nejmenších čtverců. Tyto statistické metody dovolily predikci enantiomerního složení cysteinu při velmi nízké koncentraci 10^{-4} mol l^{-1} v rozmezích enantiomerní čistoty D-formy od 100 do 60 %.

Autoři děkují za finanční podporu grantu GAČR P206/12/P026.

1Po16
STUDIUM FYZIKÁLNĚ CHEMICKÝCH VLASTNOSTÍ BINÁRNÍCH SYSTÉMŮ VODA-PEG

Zdeňka Kolská[1], Petra Parobková[2], Vladimír Henych[1], Petr Valha[1], Monika Benkocká[1], Václav Švorčík[2]

[1]Ústecké materiálovécentrum, Přírodovědecká fakulta, Univerzita J.E. Purkyně, České mládeže 8, 400 96 Ústí nad Labem, Česká republika, zdenka.kolska@ujep.cz
[2]Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

Binární směsi polyethylenglykol (PEG) - voda jsou velmi důležité v mnoha oblastech průmyslu a v medicíně. V poslední době se též hojně využívají v oblasti nanotechnologií. Tyto směsi mohou být použity jako roubovací roztoky pro navázání (roubování) nových chemických skupin na plazmatem modifikované povrchy polymerních fólií. Takto modifikované povrchy mají pak významně lepší biokompatibilní vlastnosti, což může nalézt uplatnění v oblastech tkáňového inženýrství [1]. Binární směsi PEG - voda mohou též sloužit jako disperzní prostředí pro přípravu koloidních systémů zlatých a stříbrných nanočástic [2].

Tyto směsi nejsou prozatím příliš prozkoumány a doposud bylo publikováno jen málo článků o jejich fyzikálně-chemických vlastnostech. Některé z fyzikálně-chemických vlastností (např. index lomu, viskozita, hustota, apod.) slouží jako vstupní veličiny pro studium disperzních soustav koloidních roztoků nanočástic, např. pro určení velikosti a distribuce velikosti částic či pro stanovení elektrokinetického potenciálu nanočástic.

Proto jsme se věnovali experimentálnímu stanovení hustoty, molárních dodatkových objemů a indexu lomu binárních systémů PEG – voda v závislosti na teplotě. Byly studovány PEG o molárních hmotnostech M = 200, 300, 400, 600, 1000 g·mol^{-1} v teplotním rozsahu 283,15-363,15 K.

Tato práce vznikla za podpory grantů GAČR č. P108/10/1106 a 13-06609S.

[1] Václav Švorčík, Zuzana Makajová, Nikola Slepičková Kasálková, Zdeňka Kolská, Lucie Bačáková: J. Nanosci. Nanotechno. (2012), 12:6665-6671.
[2] Jakub Siegel, Ondřej Kvítek, Pavel Ulbrich, Zdeňka Kolská, Petr Slepička, Václav Švorčík: Mater. Lett. (2012), 89:47–50.

1Po17
VLASTNOSTI A VÝSKYT ISOSTRUKTURNÍCH ŘAD SOLVÁTŮ

Iva Koupilová[1], Michal Hušák[1], Bohumil Kratochvíl[1], Václav Eigner[1], Alexandr Jegorov[2]

[1]Ústav chemie pevných látek, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, iva.koupilova@vscht.cz,
[2]Teva Czech Industries s.r.o., Branišovská 31, 370 05 České Budějovice

Při tvorbě solvátů dochází ke dvěma situacím. V prvním případě se vytvořením solvátu změní prostorová grupa, případně se zásadně změní mřížkové parametry. V druhém případě se prostorová grupa nemění, dochází k malým změnám mřížkových parametrů v důsledku výměn různě objemných rozpouštědel, tzn. jedná se o isostrukturní řadu solvátů.

Isostrukturní řady solátů tvoří bromokryptin mesylát (BKM). Původně byly známé dvě struktury: BKM anhydrát a isopropanol solvát, obojí krystalující v prostorové grupě $P2_1$. Struktura BKM dovoluje inkorporování i jiných rozpouštědel. Bylo připraveno 17 solvátů BKM v grupě $P2_1$ a dva solváty v grupě $P2_12_12_1$, BKM tedy tvoří dvě isostrukturní řady solvátů.

Pro predikci výskytu možných solvátů byl zkoumán vztah mezi objemem elementární buňky (V_E) a objemem molekuly rozpouštědla (V_R) . Testovali jsem metody výpočtu V_R založené na [1], [2]. Nejlepší lineární korelace vycházela u výpočtu V_R dle [1], kde jsme k VdW objemu atomu přidali navíc poloměr 1,4 Å.

Pro identifiakci výskytu dalších sovatomorfních řad v Cambridské strukturní databázi (CSD) jsme vytovořili program SolvatomorfFinder.

Program pracuje na základě vyhodnocování podobnosti srovnáním redukovaných mřížkových parametrů, redukovaného objemu buňky a prostorové grupy skupin solvátů dle [3]. Sovotamorfní řady z CSD jsme využily pro ověření obecné platnosti vztahu mezi V_E a V_R a pro zhodnocení četnosti výskytu těchto řad.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2013 a 604 613 7302)

[1] Brodor N., Buchwald P.: *J.Phys.Chem B* 1997, 101, 3404-3412.
[2] Hofmannn D. W. M.: *Acta Cryst.* 2002, B57, 489-493.
[3] Streek van de J.: *CrystEngComm* 2007, 9, 350-352.

1Po18
MOŽNOSTI INSTRUMENTÁLNÍ FOTONOVÉ AKTIVAČNÍ ANALÝZY S POUŽITÍM MIKROTRONU MT-25

Ivana Krausová, Jiří Mizera, Zdeněk Řanda, Zbyněk Horák, David Chvátil, Pavel Krist

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Řež 130, 250 68 Husinec-Řež, Česká republika, krausova@ujf.cas.cz

Instrumentální fotonová aktivační analýza (IPAA) je doplňkovou metodou k metodě instrumentální neutronové aktivační analýzy (INAA). Na rozdíl od INAA, jejíž základem jsou jaderné reakce vyvolané záchytem neutronu (n,γ), je PAA založena na fotojaderných reakcích, nejčastěji typu (γ,n). Tyto reakce mají energetický práh, pod nímž neprobíhají, což umožňuje při IPAA optimalizací energie svazku částečně potlačit interferenční jaderné reakce a oproti INAA snížit detekční limity pro řadu prvků. Vyšší pronikavost vysokoenergetických fotonů a nižší indukované aktivity umožňují i analýzu větších vzorků při nižší radiační zátěži personálu a lepší reprezentativnosti vzorku, především při geochemické charakterizaci [1].

Účinným zdrojem vysokoenergetického fotonového záření je sekundární brzdné záření vznikající konverzí svazku elektronů urychlených vysokofrekvenčním kruhovým urychlovačem - mikrotronem. Mikrotron MT-25 zkonstruovaný na FJFI ČVUT v Praze koncem 80. let je po převzetí ÚJF AVČR, v.v.i. a modernizaci v letech 2003-2005 pravidelně využíván pro účely IPAA, zatím pro stanovení prvků s produkty fotojaderných reakcí s delším poločasem. V současnosti je na MT-25 dokončována instalace automatizovaného pneumatického systému pro transport vzorku mezi ozařovacím místem a detektorem, což vzhledem k řadě krátkodobých produktů fotojaderných reakcí nabízí významné rozšíření analytických možností PAA. Příspěvek představuje možnosti i nedávno realizované příklady využití dlouhodobé i krátkodobé IPAA na mikrotronu MT-25 [1-3].

Tato studie byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci projektů reg. č. 13-27885S a P108/12/G108.

[1] Z. Řanda, J. Kučera, J. Mizera, J. Frána: J. Radioanal. Nucl. Chem. 271 (2007) 589–596.
[2] I. Krausová, J. Mizera, Z. Řanda, D. Chvátil, I. Sýkorová: Determination of fluorine in geochemical reference materials and coal by instrumental photon activation analysis. 10th International Multidisciplinary Scientific Geoconference SGEM 2010, 20.-26.6.2010, Albena, Bulharsko, Conf. Proceedings Vol. II pp. 229-236, ISBN 978-954-91818-1-4.
[3] I. Krausová, J. Mizera, D. Chvátil, P. Krist, Z. Řanda, J. Kučera, J. Štursa: Nedestruktivní stanovení dusíku v biologických a jiných materiálech fotonovou aktivační analýzou. Seminář Mikroelementy 2012, 14.-16.5.2012, Valtice, Sborník přednášek, pp. 123-127, ISBN 978-80-904539-4-4.

1Po19
VAZBA CISPLATINY NA CYTOPLAZMATICKOU ČÁST SODNO-DRASELNÉ ATPASY

Martin Kubala[1], Miroslav Huličiak[1], Marek Šebela[2], Eva Orolinová[3], Joanna Znalezionna[3], Marika Havlíková[3], Jan Vacek[3]

[1]Katedra biofyziky, Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, 17.listopadu 12, 77146 Olomouc
[2]Katedra biochemie, Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, 17.listopadu 12, 77146 Olomouc
[3]Ústav lékařské chemie a biochemie, Lékařská fakulta UP v Olomouci, Hněvotínská 3, 77515 Olomouc
mkubala@prfnw.upol.cz

Cisplatina je nejpoužívanějším chemoterapeutikem proti několika druhům karcinomů. Její užívání je však spojeno s celou řadou nežádoucích vedlejších účinků, jako je např. neurotoxicita, gastrotoxicita, malátnost a další. Jedním z nejzávažnějších omezení při terapii je hrozba akutního selhání ledvin.

V naši práci jsme se zaměřili na hypotézu, že za nežádoucí vedlejší účinky je zodpovědná inhibice Na^+/K^+-ATPasy cisplatinou. Ukázali jsme, že cisplatina skutečně tento enzym inhibuje a blíže jsme studovali její interakci s izolovanými cytoplazmatickými segmenty enzymu. Pomocí elektrochemických metod a hmotnostní spektrometrie jsme prokázali, že cisplatina reaguje s velkou cytoplazmatickou kličkou (C45) se stechiometrií 4:1 při saturačních podmínkách, přičemž jsme prokázali, že dochází k vazbě na cysteinová rezidua. Také u malé cytoplazmatické kličky (C23) jsme prokázali vazbu na cystein, v tomto případě je pravděpodobná stechiometrie 1:1.

Na základě srovnání našich dat se strukturou enzymu získanou pomocí rentgenové krystalografie se domníváme, že inhibice enzymu navázanou cisplatinou je pravděpodobně způsobena bráněním fosforylace (nebo defosforylace), nebo narušením vzájemné interakce cytoplazmatických domén během katalytického cyklu [1].

Tento projekt je podporován grantem Grantové agentury Ministerstva zdravotnictví NT11071.

[1] Miroslav Huličiak a kol.: Biochemical Pharmacology 83, 1507-1513 (2012)

1Po20
DETERMINATION OF TRICLOSAN AT CARBON PASTE ELECTRODE USING DIFFERENTIAL PULSE VOLTAMMETRY

Jan Mika[1], Petra Mala[1], Edita Vranova[1], Jiri Barek[1], Jiri Zima[1], Hana Dejmkova[1]

[1]Charles University in Prague, Faculty of Science, University Research Centre „Supramolecular Chemistry", Department of Analytical Chemistry, UNESCO Laboratory of Environmental Electrochemistry, Albertov 6, CZ–12843 Prague 2, Czech Republic, mikaja@natur.cuni.cz

Electrochemical behaviour of an antibacterial and antifungal agent triclosan [1,2] in presence of Britton-Robbinson (B-R) buffer and methanol at carbon paste electrode (CPE) was examined. Influence of pH and composition of supporting electrolyte was studied at conventional-sized CPE and the validation procedures were measured also at a miniaturized version of CPE using differential pulse voltammetry (DPV).

Optimal pH of B-R buffer was 11 and B-R buffer was replaced by less complex phosphate buffer of this pH. No difference in voltammetric signal in the media with various amounts of added methanol was observed. Accumulation on the electrode surface was insignificant.

Concentration dependences were measured for both used types of CPE in pure buffer, drinking water and river water. They are linear from 100 μmol L^{-1} to determination limits, which all reach similar values between approximately 0.3 and 0.5 μmol L^{-1}.

Also applicability of DPV to the determination of troclosan in real samples of personal care products was evaluated using standard addition method and the obtained results were compared with results from HPLC with spectrophotometric detection.

This work was performed in the framework of Specific university research (SVV 267215). Financial support from the Czech Ministry of Education, Youth and Sports (project MSM 0021620857) and the Grant Agency of the Czech Republic (project no. P206/12/G151) is gratefully acknowledged.

[1] Dann A. B.; Hontela A.: J. Appl. Toxicol. *31*, 285-311 (2011).
[2] U. S. Enviromental Protection Agency, Triclosan - Occupational and Residential Exposure Assessment, Washington, DC, (2008). http://oehha.ca.gov/prop65/public_meetings/052909coms/triclosan/ciba9.pdf (accessed 24.6. 2013).

1Po21
AKTIVAČNÍ ANALÝZA PŘI STUDIU TEKTITŮ A IMPAKTOVÝCH SKEL

Jiří Mizera, Zdeněk Řanda

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v.v.i., Řež 130, 250 68 Husinec-Řež, Česká republika, mizera@ujf.cas.cz

Impaktová skla a tektity vznikají v důsledku dopadu velkých meteoritů na zemský povrch (impaktu) roztavením a vyvržením povrchových materiálů, především nezpevněných sedimentů a sedimentárních hornin. Metodami aktivační analýzy byly studovány středoevropské tektity – vltavíny , impaktová skla z kráteru Žamanšin v Kazachstánu – irgizity, a australoasijské tektity.

Geochemická analýza rozsáhlého reprezentativního souboru vltavínů naznačuje, že součástí zdrojových materiálů byla kromě povrchových sedimentů zřejmě i půdní vrstva a rostlinná biomasa, která je indikována obohacením prvky esenciálními pro rostliny (K, Ca, Mg) a ochuzením o prvky neesenciální (Na, Rb, Sr, Ba), podobně jako při jejich redistribuci během transferu z půdy do rostliny. Hypotézu podporuje i analýza izotopového složení uhlíku ve vybraných vltavínech [1,2].

Geochemická analýza souboru irgizitů umožnila na základě obsahů Ni, Cr, Mn, Fe a Co korigovaných na jejich hodnotu pozadí z pozemských zdrojových materiálů určit typ impaktoru jako běžný chondrit třídy L5 nebo L6, a odhadnout podíl jeho hmoty ve zdrojovém materiálu analyzovaných irgizitů na 4 až 21 hmot.% [3].

Určení zdrojových materiálů a lokalizace mateřského kráteru australoasijských tektitů zůstávají dosud otevřenou otázkou. Geochemická analýza souboru australoasijských tektitů zpochybňuje všeobecně předpokládanou lokalizace kráteru v Indočíně a přináší důkazy svědčící o jeho možné lokalizaci v pouštích v severní části centrální Číny.

Tato studie byla podpořena Grantovou agenturou ČR v rámci projektů reg. č. 205/09/0991 a 13-22351S .

[1] Z. Řanda, J. Mizera, J. Frána, J. Kučera: Meteorit. Planet. Sci. 43 (2008) 461–467.
[2] K. Žák, R. Skála, Z. Řanda, J. Mizera: Meteorit. Planet. Sci. 47 (2012) 1010-10282.
[3] J. Mizera, Z. Řanda, I. Tomandl: J. Radioanal. Nucl. Chem. 293 (2012) 359-376.

1Po22
VYUŽITÍ EXPERIMENTU PŘI VÝUCE VYSOKOÚČINNÉ KAPALINOVÉ CHROMATOGRAFIE

Karel Musil[1], Vlastimil Dohnal[1]

[1]*Univerzita Hradec Králové, Rokitanského 62, 500 03 Hradec Králové, karel.musil@uhk.cz*

Vysokoúčinná kapalinová chromatografie (HPLC) je moderní separační metodou. Studenti seznamováni v průběhu vysokoškolského studia chemie, neboť tato metoda nachází uplatnění v mnoha kontrolních i výzkumných laboratořích. Příspěvek reflektuje vývoj instrumentace v analytické chemii na Katedře chemie Univerzity Hradec Králové. Představuje inovaci ve vybavení HPLC probíhající v průběhu roku 2013. Porovnává základní charakteristiky obou přístrojů, stejně jako jejich konečný potenciál využitelnosti ve výzkumu. V příspěvku jsou porovnány i analytické charakteristiky obou přístrojů, vysvětlen efekt inovací hardwaru na jednotlivé charakteristiky separačních procesů. Byly změřeny a porovnány ukázkové separace vybraných vzorků. Takto získaná data jsou zpracována pro výuku instrumentálních metod i ve formě prezentace.

Za záštitu nad studií patří poděkování projektu MŠMT OPVK CZ.1.07/2.2.00/28.0118

1Po23
VYUŽITÍ PENCIL GRAFITOVÝCH ELEKTROD (PeGE) PRO STANOVENÍ PURINŮ

Rudolf Navrátil[1], František Jelen[2], Libuše Trnková[1,3*]

[1]*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta MU, Kamenice 5, 625 00 Brno,* libuse@chemi.muni.cz
[2]*Biofyzikální ústav, Akademie věd České republiky, v.v.i., Královopolská 135, CZ-612 65 Brno, Česká republika*
[3]*Central European Institute of Technology-CEITEC, Vysoké učení technické v Brně, Technická 3058/10, 616 00 Brno*

Pencil grafitová elektroda (PeGE) je jednoduchým, levným a netoxickým prototypem elektrochemického senzoru. Může mít mnohostranné využití, např. stanovení oxidačního chování biologicky aktivních látek, které hrají klíčovou roli v metabolických procesech živých organismů [1]. V práci jsou studovány vlivy změn ve složení povrchu PeGE na detekci purinových derivátů. Pro tyto účely bylo využito adsorpčních rozpouštěcích technik v kombinaci

s lineární sweep voltametrií (LSV) a eliminační voltametrií (EVLS). Ke zvýšení citlivosti detekce purinů probíhala analýza v přítomnosti iontů mědi Cu(II), které jsou schopny v redukované formě vytvářet s puriny málo rozpustné komplexy Cu(I)-purin [2,3]. Bylo zjištěno, že i velmi malá změna ve struktuře povrchu PeGE významně ovlivňuje oxidační signály purinů. Z tohoto důvodu bylo nutné charakterizovat elektrodový povrch pomocí mikroskopických a spektroskopických metod. Na základě komparativních experimentů byly vybrány potenciálně nejvhodnější elektrody jako potenciální senzory purinů.

Náš výzkum byl podporován uvedenými projekty: (a) MUNI/A/0992/2009 MŠMT ČR; (b) CEITEC – Central European Institute of Technology CZ.1.05/1.1.00/02.0068; (c) OPVK projekt (NanoBioMetalNet) CZ.1.07/2.4.00/31.0023 a (d) KONTAKT II (LH 13053)MŠMT ČR.

[1] G. Dryhurst, Electrochemistry of Biological Molecules, Academic Press, New York, 1977.
[2] R. Navratil, I. Pilarova, F. Jelen, L. Trnkova, Int. J. Electrochem. Sci. 2013.
[3] L. Trnkova, F. Jelen, M. Ozsoz, Electrochemical Transducer for Oligonucleotide Biosensor Based on the Elimination and Adsorptive Transfer Techniques 2012.

1Po24
CHIRÁLNÍ SEPARACE SOLIFENACINU KAPILÁRNÍ ELEKTROFORÉZOU S VYUŽITÍM DERIVÁTŮ CYKLODEXTRINU JAKO CHIRÁLNÍCH SELEKTRORŮ

Klára Navrátilová[1], Pavel Řezanka[1], Helena Ryšavá[1], Vladimír Král[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická, Ústav analytické chemie, Technická 5/16628 , Praha 6*

Solifenacin je selektivní muskarinový blokátor používaný při léčbě příznaků dolního močového traktu a syndromu hyperaktivního měchýře[1]. Snižuje napětí hladkého svalstva močového měchýře, což umožňuje udržet větší množství moči, snižuje počet močení a inkontinenčních příhod.

V této práci byl sledován vliv přidání chirálního selektoru do základního elektrolytu na účinnost enantioseparace solifenacinu v kapilární elektroforéze. Jako chirální selektory byly použity β-cyklodextrin a jeho deriváty karboxymethyl-β-cyklodextrin a sulfatovaný β-cyklodextrin. Dále byl sledován vliv pH základního elektrolytu na účinnost separace solifenacinu. Separace probíhaly v křemenné kapiláře s vnitřním průměrem 75 μm a délkou 58,5/50 cm.

Tato práce byla podpořena granty MSM 20/2013 a P206/12/0453.

[1] Steven A. Kaplan, Weizhong He, William D. Koltun, Jana Cummings, Tim Schneider, Allam Fakhoury: European Urology, *63*, 158 (2013).

1Po25
URČOVANIE HYPERPOLARIZOVATEĽNOSTI MOLEKÚL METÓDOU HYPER-RAYLEIGHOVHO ROZPTYLU

E. Noskovičová, D. Lorenc, D. Velič

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 84215 Bratislava, Slovenská republika, noskoviov.nereyn.eva1@gmail.com

Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 84104 Bratislava,

Elektromagnetické žiarenie, ktorého elektrická intenzita je porovnateľná s intenzitou vlastného poľa atómu a teda má hodnotu 10^9 - 10^{11} m/V môže vyvolať nelineárnu odozvu prostredia. Takáto odozva sa potom prejaví generáciou vyšších harmonických frekvencií. [1] Prostredia, ktoré prejavujú intenzívnu generáciu vyšších harmonických sú potenciálne využiteľné v oblasti komunikačných technológií.

Jednou z metód na charakterizáciu druhej harmonickej frekvencie je metóda hyper-Rayleighovho rozptylu, čo je metóda na určenie hyperpolarizovateľnosti (nelineárna polarizovateľnosť prvého rádu). Prechodom laserového lúča (koherentné žiarenie) intenzity na úrovni 10^{14} W/cm^2 cez kvapalnú vzorku sa pri tejto metóde generuje žiarenie s frekvenciou dvojnásobnou, oproti vstupnému žiareniu. Touto metódou sa potom dá určiť hyperpolarizovateľnosť zo závislosti intenzity druhej harmonickej frekvencie od koncentrácie vzorky v roztoku, ktorá by mala byť lineárna. Potom sa hyperpolarizovateľnosť vypočíta ako

$$\left(\beta_{\zeta\zeta\zeta}\right)^2_{sl} = \left(\frac{b_1}{b_0}\right) N_{SV}\left(\beta_{\zeta\zeta\zeta}\right)^2_{SV} = \left(\frac{b_1}{b_0}\right) \frac{\rho_{SV} N_A}{M_{SV}} \left(\beta_{\zeta\zeta\zeta}\right)^2_{SV} \quad [2]$$

kde $(\beta_{\xi\xi\xi})_{SL}$ je hyperpolarizovateľnosť vzorky ($3{,}71\text{x}10^{-21}$Cm^3/V^2=esu), $(\beta_{\xi\xi\xi})_{SV}$ je hyperpolarizovateľnosť rozpúšťadla [esu], N_{SV} je počet častíc na objem rozpúšťadla [dm^{-3}], M_{SV} je mólová hmotnosť rozpúšťadla [dm^{-3}], N_A je Avogadrova konštanta (N_A = 6,022x1023 mol^{-1}),

b_1 je smernica priamky [dm^3], b_0 je úsek priamky [dm^3].

Na meranie sa použila kryštálová violeť s koncentráciami 0,0002; 0,0004; 0,0006 M. Intenzita druhej harmonickej frekvencie pre tieto koncentrácie bola 15; 35 a 52 r.j.. Hyperpolarizovateľnosť bola stanovená na 705,62x10-30 esu.

Poďakovanie: Kolektívu Prof. P. Zahradníka za prípravu a poskytnutie vzoriek.

[1] Štrba A., Mesároš V., Senderáková D. (2012) Nelineárna optika. In: Štrba A., Mesároš V. Senderáková D. Optika. Enigma publishing, Nitra, SR, p. 371

[2] Sutherland D.R. (2003) Hyper-Rayleigh Scattering. In: Sutherland D.R. Handbook of Nonlinear Optics, Second Ed. Marcel Dekker, New York, p.286

1Po26
BIS-TRÖGER BASES MOLECULAR TWEEZER COMPLEXES – UNCOVERING INTERACTION ORIGIN

Václav Parchaňský[1,2], Milan Jakubek[1], Vladimír Král[1], Bohumil Dolenský[1]

[1]*Institute of chemical technology Prague, Technická 5, 166 28 Prague 6*
[2]*Institute of organic chemistry and biochemisty AS CR, Flemingovo nám. 2, 166 10 Prague 6*

Molecular tweezers based on bis-Tröger bases are promising systems for molecular recognition[1]. In the presented work, complexation properties of two of those systems are studied. Studied systems, though geometrically similar show significant difference[2] in their interaction constants. Theoretical computations were performed to reproduce this difference. Studied tweezers were partitioned into particular interaction domains and their contribution individually assessed. Obtained results can be used in rational tweezer design.

Project was supported by finacial support from specific university research (MSMT No 20/2013).

[1] Dolensky, B.; Havlik, M.; Kral, V. *Chem. Soc. Rev.* **2012,** *41*, 3839-3858.

[2] Jakubek, M., Dolenský B., Havlík, M. *Chem. Listy* **2012**, *106*, 43–46

1Po27
VELMI RYCHLÉ ELEKTROFORETICKÉ STANOVENÍ KREATININU A KYSELINY MOČOVÉ V LIDSKÉ MOČI POMOCÍ SPOJENÍ DVOU KAPILÁR O RŮZNÝCH VNITŘNÍCH PRŮMĚRECH

Václav Pavlíček[1], Petr Tůma[1] a Eva Samcová[1]

[1]*Ústav biochemie, molekulární a buněčné biologie, 3. lékařská fakulta Univerzity Karlovy v Praze, Ruská 87, 100 00 Praha 10, Česká republika, e-mail: VPavlicek@gmail.com*

Stanovení kreatininu a kyseliny močové bylo provedeno v kapiláře vytvořené spojením 9,7 cm kapiláry o vnitřním průměru 25 μm a 22,6 cm kapiláry s vnitřním průměrem 100 μm [1]. 25 μm kapilára slouží jako vlastní separační kapilára a je v ní dosaženo intenzity elektrického pole 2,3 kV/cm (běžně se pracuje při intenzitách elektrického pole menších než 1,0 kV/cm). Stanovení kreatininu bylo úspěšně provedeno v optimalizovaném separačním pufru o složení 20 mM kyselina citronová / NaOH (pH 3,0) a stanovení kyseliny močové v 20 mM MES / NaOH (pH 6,0). Za těchto podmínek bylo dosaženo migračního času 12,2 s pro kreatinin a 8,5 s pro kyselinu močovou. Hodnoty limitu detekce jsou 2,4 mg/L pro kreatinin a 0,9 mg/L pro kyselinu močovou při použití UV detekce (kreatinin byl měřen při 214 nm a kyselina močová při 292 nm). Tyto hodnoty jsou dostatečně nízké pro stanovení obou analytů ve vzorku 20 až 50násobně ředěné lidské moči. Stanovené hodnoty kreatininu (220 – 1320 mg/L) a kyseliny močové (87 – 615 mg/L) v 7 vzorcích lidské moče plně odpovídají hladinám stanovených pomocí referenčních metod používaných v laboratořích klinické biochemie (Jaffého reakce pro kreatinin a enzymatická metoda s urikázou pro kyselinu močovou). Vyvinutá metodika je vhodným nástrojem pro monitorování hladin kreatininu a kyseliny močové v rozsáhlých souborech vzorků.

Práce vznikla za finanční podpory Grantové agentury Univerzity Karlovy, grant č. 389111, UNCE 204015 a Grantové agentury ČR, grant č. P206/11/0707.

[1] Tůma, P., Opekar, F., Samcová, E.: Electrophoresis. 34, 522 (2013).

1Po28
VYUŽITÍ TECHNIKY DIFUZNÍHO GRADIENTU V TENKÉM FILMU PRO MONITOROVÁNÍ LABILNÍCH CHEMICKÝCH FOREM RTUTI VE VODNÝCH VZORCÍCH

Pavlína Pelcová, Hana Dočekalová, Andrea Kleckerová

Ústav chemie a biochemie, Mendelova univerzita v Brně, Zemědělská 1, 61300 Brno, pavlina.pelcova@mendelu.cz

Protože přirozené obsahy chemických forem rtuti ve vzorcích vod jsou nízké, pohybují se v jednotkách μg l^{-1} až ng l^{-1}, může při odběru vzorku docházet ke kontaminaci, ale i ztrátám analytu [1]. Tyto problémy lze vyřešit tzv. měřením „in situ“. K „in situ“ měření stopových koncentrací volných a labilních chemických forem rtuti lze využít techniku difuzního gradientu v tenkém filmu (DGT) [2].

DGT technika byla testována pro měření čtyř chemických forem rtuti (Hg^{2+}, CH_3Hg^+, $CH_3CH_2Hg^+$, $C_6H_5Hg^+$). Chemické formy rtuti difundovaly přes difuzní vrstvu tvořenou agarosovým gelem a byly akumulovány v sorpčním polyakrylamidovém gelu, který obsahoval selektivní iontoměnič Duolit GT73 nebo doposud netestovaný Ambersep GT74. Oba iontoměniče obsahovaly navázané thiolové funkční skupiny. Sorpční kapacita testovaných gelů byla pro Duolit GT73 12 μmol Hg $disk^{-1}$ a pro Ambersep GT74 18 μmol Hg $disk^{-1}$. Pro všechny sledované chemické formy rtuti byly stanoveny difuzní koeficienty (Hg^{2+}: (7,02±0,23)x10^{-6} cm^2 s^{-1}, CH_3Hg^+: (7,01±030) x10^{-6} cm^2 s^{-1}, $CH_3CH_2Hg^+$: (5,32±0,18)x10^{-6} cm^2 s^{-1}, $C_6H_5Hg^+$: (1,88±0,15)x10^{-6} cm^2 s^{-1} při 16 °C). Byly studovány faktory ovlivňující sorpci i difuzi jednotlivých chemických forem rtuti v technice DGT (pH, iontová síla, vliv potenciálně konkurujících iontů, huminových látek). Metoda byla využita pro zakoncentrování chemických forem rtuti v obohaceném vzorku říční vody.

Účast na semináři byla finančně podpořena v rámci projektu Inovace studijních programů AF a ZF MENDELU směřující k vytvoření mezioborové integrace CZ.1.07/2.2.00/28.0302.

[1] Houserová P., Janák K., Kubáň P., Pavlíčková J., Kubáň V.: Chem. Listy 100, 862-876 (2006).
[2] Zhang H., Davison W.: Anal. Chem. 67, 3391-3400 (1995).

1Po29
ELEKTROCHEMICKÁ ANALÝZA DNA MINI-HAIRPINU d(GCGAGC)

Iveta Pilařová[1], Zdeňka Balcarová[1], Libuše Trnková[1,2]

[1] Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta MU, Kamenice 5, 625 00 Brno, 175126@mail.muni.cz, libuse@chemi.muni.cz
[2] Central European Institute of Technology-CEITEC, Vysoké učení technické v Brně, Technická 3058/10, 616 00 Brno

DNA hairpiny hrají důležitou roli v klíčových biochemických procesech na buněčné úrovni, neboť jsou považovány za potenciální rekogniční místa pro regulační proteiny, řídící životní cykly [1]. Nejznámější a nejkratší hairpin je DNA heptamer d(GCGAAGC). Je spojován s rozvojem opakujících se trinukleotidových sekvencí v řetězci DNA, mající za následek rozvoj neurodegenerativních onemocnění [2]. V poslední době bylo na základě semi-empirické strukturní a energetické analýzy dokázáno, že kratší hexamerní hairpin, d(GCGAGC) složený z $d(GC)_2$ kmene a GA smyčky, může existovat v roztoku [1].

Z pohledu elektrochemie, DNA oligomery (hexamery i heptamery) poskytují na rtuťové elektrodě ve vodných pufrovaných roztocích charakteristické redukční signály adeninových a cytosinových (A+C) residuí a oxidační signály guaninových (G) residuí [3].

Cílem našeho výzkumu je voltametrická analýza (Voltametrie s lineárně se měnicím potenciálem – **L**inear **S**weep **V**oltammetry – **LSV** a Eliminační voltametrie a lineárním skenem – **E**limination **V**oltammetry With **L**inear **S**can – **EVLS**) DNA mini – hairpinu d(GCGAGC), přičemž voltametrický experiment dovoloval nejen sledovat charakter redukčních (A+C) signálů s možností jejich rozdělení na elektrodě, ale i charakter oxidačních (G) signálů, vlivem měnící se koncentrace ($4.5 \cdot 10^{-8}$ M – $8.55 \cdot 10^{-7}$ M) studovaného hexameru a pH pufrovaných roztoků (fosfátový – acetátový pufr; pH 3.57 – 6.54).

Náš výzkum byl podporován uvedenými projekty: (a) MUNI/A/0992/2009 MŠMT ČR; (b) CEITEC – Central European Institute of Technology CZ.1.05/1.1.00/02.0068; (c) OPVK projekt (NanoBioMetalNet) CZ.1.07/2.4.00/31.0023 a (d) KONTAKT II (LH 13053)MŠMT ČR.

[1] Y.V. Rubin, L.F. Belous, and M.P. Evstigneev: Journal of Molecular Structure, (2012)
[2] I. Hirao, et al.: Nucleic Acids Research, (1994)
[3] L.Trnkova, I. Postbieglova, and M. Holik: Bioelectrochemistry, (2004)

1Po30
STANOVENÍ VYBRANÝCH KOVŮ V KLINICKÝCH MATERIÁLECH PO REVIZNÍCH OPERACÍCH KLOUBNÍ NÁHRADY

Tomáš Pluháček[1], David Milde[1], Martin Kuba[1], Jiří Gallo[2]

[1]*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, Česká republika*
[2]*Ortopedická klinika, Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci a Fakultní nemocnice Olomouc, Česká republika*

Pacientům, jejichž klouby jsou poškozeny, může implantace kloubní náhrady prodloužit aktivní život.[1] Nejčastěji používanými materiály kloubních náhrad jsou slitiny titanu a CoCr slitiny. Korozí kloubních náhrad se kovy uvolňují nejen do okolí náhrady ale mohou být trasportovány tělními tekutinami do vzdálených orgánů, kde se mohou akumulovat.[2,3] V příspěvku je posán vývoj a porovnání dvou instrumentálních technik pro stanovení vybraných kovů (Ti, V, Cr, Mn, Co, Ni a Pb) v klinických vzorcích pomocí hmotnostní spektrometrie s indukčně vázaným plazmatem.

Analyzované vzorky tkání a kloubních výpotků byly odebrány při revizních operacích pacientům Ortopedické kliniky Fakultní nemocnice v Olomouci. Vzorky tkání byly před rozkladem lyofilizovány a rozklad probíhal v mikrovlnném systému s využitím HNO_3 a H_2O_2. K analýzám byly využity dva spektrometry ICP-MS ORS-ICP-MS (7700x, Agilent, Japonsko) a ICP-oa-TOF-MS (Optimass 9500, GBC, Austrálie). K verifikaci metod byly použity certifikované refrenční materiály.

Obě techniky byly verifikovány pomocí uvedených parametrů: pravdivost, preciznost, kalibrační křivka, mez detekce, mez stanovitelnosti, nejistota měření. Naměřené koncentrace Ti ve vzorcích tkání byly v rozmezí 0,044 – 72,067 μg/g, V < DL – 1,802 μg/g, Cr < DL – 226,314 μg/g, Mn < DL – 80,315 μg/g, Co < DL – 421,024 μg/g, Ni < DL – 621,941 μg/g a Pb < DL – 1,215 μg/g.

Tento výzkum byl financován z Operačního programu Výzkum a vývoj pro inovace (projekt CZ.1.05./2.1.00/03.0058) a z Operačního programu Vzdělání pro konkurenceschopnost (projekt CZ.1.07/2.2.00/15.0283), Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

[1] Sarmiento-González A., Encinar J. R., Marchante-Gayón J. M., Sanz-Medel A.: Anal. Bioanal. Chem. 393, 335 (2009).
[2] Rubio J. C., Garcia-Alonso M. C., Alonso C., Alobera M. A., Clemente C., Manuera L., Escudero M. L.: J Mater Sci: Mater Med 19, 369 (2008).
[3] Case C. P., Ellis L., Turner J. C., Fairman B.: Clin. Chem. 47, 275 (2001).

1Po31
FOTOAKTIVÁCIA NA TENKOM FILME TIO_2 NA SKLE ZADNOU AKTIVÁCIOU UV SVETLOM

Michal Procházka[1], Monika Stupavská[2], Dušan Velič[3]

[1]*Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15, Bratislava, prochazkam@fns.uniba.sk*
[2]*Masarykova univerzita, Přírodovědecká fakulta, Ústav fyzikální elektroniky, Kotlářská 267/2, Veveří, Brno*
[3]*Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 841 09 Bratislava*

Nanokryštalický oxid titaničitý (nc-TiO_2) je polovodičový fotokatalyzátor. Vplyvom UV žiarenia vznikajú na povrchu nc-TiO_2 radikály, ktoré môžu následne rozkladať iné látky nachádzajúce sa na povrchu. Aby tento proces prebiehal efektívne, musí na povrch nc-TiO_2 dopadať UV svetlo s dostatočnou intenzitou a vhodnou vlnovou dĺžkou[1]. Cieľom tejto práce bolo sledovanie degradácie cholesterolu, ako modelového príkladu organického znečistenia, na povrchu nc-TiO_2. Tenké filmy nc-TiO_2 boli pripravené sedimentáciou nanoprášku na kremenné sklo [2]. Tento typ skla bol vybraný z dôvodu, že prepúšťa svetlo aj v UV oblasti s dostatočnou intenzitou. Preto bolo možné systém cholesterol/nc-TiO_2/sklo ožarovať z hornej strany (zo strany cholesterolu) a aj zo spodnej strany (zo strany skla) a tieto výsledky porovnávať. V práci boli vzorky analyzované hmotnostnou spektrometriou sekundárnych iónov (SIMS) po ožarovaní UV LED diódou s vlnovou dĺžkou 365 nm každých 15 minút po dobu 2 hodín.

V hmotnostných spektrách je dobre stanovená závislosť znižovania intenzity píkov zodpovedajúcim fragmentom cholesterolu $[M–OH]^+$, $[M–H]^+$ a $[M+CH_3]^+$, v závislosti od dĺžky ožarovania vzoriek UV svetlom. Porovnaním intenzít píkov pri ožarovaní z hornej strany a zo

spodnej strany je zrejmé, že pri ožarovaní zo spodnej strany je pokles o niečo menší, čo môže byť spôsobené znížením intenzity svetla prechodom cez vrstvu kremenného skla a tiež vrstvu nc-TiO_2. Avšak toto zníženie je malé a preto možno aj tento spôsob využívať na efektívnu degradáciu organických nečistôt na povrchu. Tento spôsob má výhodu v tom, že pri ožarovaní zo spodnej strany sa čiastočne vylúči vplyv UV žiarenia na priamu dedradáciu látok na povrchu.

Táto práca vznikla za podpory grantov ERDF OP R&D, Project 'meta-QUTE- Centrum excelentnosti kvantových technológií', APVV-0491-07, UK/66/2012, NanoNet2.

[1] FUJISHIMA, A. – HASHIMOTO, K. – WATANABE, T. 1999. TiO_2. Photocatalysis, Fundamentals and Applications, BKC, Inc., 1999, ISBN 4-969051-03-X.

[2] PROCHÁZKA, M. 2011. Hmotnostná spektrometria rozkladu cholesterolu na povrchu fotokatalyzátora TiO_2: diplomová práca. Bratislava : PriFUK, 2011. 61 s.

1Po32
LASER ABLATION SYNTHESIS OF NEW GOLD ARSENIDES USING NANO-GOLD AND ARSENIC AS PRECURSORS. LDI-TOF MASS SPECTROMETRY AND SPECTROPHOTOMETRY

Lubomír Prokeš[1,2,3], Nagender Reddy Panyala[1,2,3], Milan Alberti[1,2,3], Eladia María Peña-Méndez[4], Jose Elias Conde[4] and Josef Havel[1,2,3]

[1]Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 625 00 Brno, Czech Republic, luboprok@gmail.com
[2]Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic
[3]CEPLANT, R&D Center for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications, Masaryk University, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Czech Republic
[4]Department of Analytical Chemistry, Nutrition and Food Science, Faculty of Chemistry, University of La Laguna, Campus de Anchieta, 38071 La Laguna, Tenerife, Spain

Gold arsenides are important compounds for industrial applications, especially in micro–electronics. However, their chemical structure is still not completely resolved. Apart from chemical methods of synthesis, laser ablation synthesis (LAS) has a great potential for generation of new compounds.

The gold-arsenide clusters, Au_mAs_n, were generated via laser ablation of arsenic-nanogold and arsenic–auric acid mixtures, while mass spectrometric analysis of laser generated clusters was done using a mass spectrometer equipped with quadrupole ion trap, reflectron and time of flight analyser. The stoichiometry of clusters formed via LAS was determined by computer modelling.

Formation of positively and negatively charged gold Au_m and arsenic As_n clusters was observed during the laser ablation of nanogold and arsenic precursors, while laser ablation of mixtures constituted by arsenic–nanogold and arsenic–auric acid yielded several series of $Au_mAs_n^{+(-)}$ clusters with different stoichiometry according to the gold/arsenic ratio in the mixtures. In general, stoichiometries of more than 800 various clusters were determined and possible structures are discussed.

Knowledge about the generation of Au_mAs_n clusters might be useful as a motivation to synthesise new Au-As materials with specific properties.

1Po33
„NORMÁLNE" ANOMÁLNE VLASTNOSTI VODY

Ladislav Rábara

Univerzita sv. Cyrila a Metoda, nám. J. Herdu 2, 917 01 Trnava, ladislav.rabara@ucm.sk

Vlastnosti vody ako chemickej substancie sa vyznačujú niekoľkými neobyčajnými odchýlkami v homologickom rade zlúčenín vodíka s chalkogénnymi prvkami typu H_2Y (Y = O, S, Se, Te, Po). Z chemického hľadiska je voda zlúčeninou dvoch plynov, pričom je za bežných podmienok na našej planéte vo forme kvapaliny s bodom varu vyšším o 100 °C v porovnaní s teoretickým výpočtom. Jej jedinečnosť je daná existenciou tzv. vodíkových väzieb medzi atómami vodíka jednej molekuly a voľnými elektrónovými párami atómov kyslíka okolitých molekúl, kedy voľné a väzbové elektrónové páry kyslíkových atómov smerujú do vrcholov deformovaného tetraédra [1]. Vytvorený kvapalný kryštál vyniká vysokou variabilitou geometrie ako molekúl, tak aj vodíkových väzieb, zachovajúc si schopnosť preskupovať vodíkové väzby a vytvárať klastre [2]. Tieto sú príčinou anomálnych fyzikálnochemických vlastností. Vďaka nim je voda nielen ideálnym prostredím pre množstvo chemických premien umožňujúc život na Zemi vôbec, ale aj príčinou v poslednom období živo diskutovaného pamäťového efektu

vodných roztokov. Tento efekt sa popisuje ako schopnosť vody zachovať si aktuálnu štruktúru aj po odstránení rozpustených látok. Molekuly vody sa vďaka svojmu dipólovému momentu zorientujú okolo solvatovaných častíc vytvoriac štruktúru jedinečnú pre každú zlúčeninu, pričom každá z týchto štruktúr poskytuje iné termoluminiscenčné spektrum. Štruktúra kvapalného kryštálu vody je naviac citlivá na javy v jej bezprostrednom okolí, čo sa prejaví na vzhľade kryštálikov ľadu pri mrznutí kvapiek vyšetrovanej vody [3].

Táto práca vznikla za podpory grantov VEGA1/0233/12 a APVV-0014-11.

[1] Martin Chaplin: Models for water. /http://www.lsbu.ac.uk/water/models.htmlS, accessed on 5 May 2007.
[2] J. GUO, Y. LUO: Molecular structure in water and solutions studied by photon-in/photon-out soft X-ray spectroscopy. In Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena **177** (2010) 181 – 196
[3] Masaru Emoto: The Miracle of Water, Atria Books 2010, 160 p.

1Po34
STANOVENIE RUTÉNIA V RÔZNORODÝCH KVAPALNÝCH MÉDIÁCH POUŽITÍM ATÓMOVEJ ABSORPČNEJ SPEKTROMETRIE S VYSOKÝM ROZLÍŠENÍM, KONTINUÁLNYM ZDROJOM ŽIARENIA A ATOMIZÁCIOU V GRAFITOVEJ PECI (HR-CS GFAAS)

Dagmar Remeteiová[1], Miroslava Smrčová[1], Silvia Ružičková[1]

[1] *Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 042 00 Košice, dagmar.remeteiova@tuke.sk*

Ruténium je často používané ako aktívna zložka nosičových katalyzátorov v hydrogenačných reakciách. Špecifická aktivita katalyzátora a jeho použiteľnosť vo viacerých hydrogenačných cykloch závisí od obsahu aktívnej zložky. V priebehu procesu môže dojsť k stratám aktívnej zložky, čo ovplyvní účinnosť hydrogenácie. Sledovanie obsahu aktívnej zložky v reakčnej zmesi v konfrontácii s jej obsahom v katalyzátore je dôležité najmä pri vývoji nových typov katalyzátorov. Použitie metódy HR-CS GFAAS na stanovenie Ru, aj napriek tomu, že disponuje mnohými výhodami oproti klasickým metódam GFAAS je limitované a v aplikačných materiáloch zatiaľ nie sú zaevidované pracovné podmienky akými sú: teplota pyrolýzy, atomizácie a pracovný rozsah kalibrácie.

Cieľom optimalizačnej štúdie bolo nájsť vhodné teploty dôležitých krokov teplotného programu (sušenie, pyrolýza a atomizácia) ako aj možnosti kalibrácie, resp. použiteľný kalibračný rozsah pre stanovenie ruténia vo vodnom prostredí (prostredie po rozklade katalyzátorov) a v anilíne (prostredie reakčnej zmesi v procese hydrogenácie nitrobenzénu na anilín). Výsledky síce poukázali na vysoké hodnoty teplôt pyrolýzy (1600 °C) aj atomizácie (2600 °C), vyššie hodnoty hraníc dôkazu a zhoršenie parametrov kalibrácie oproti Pd (tiež častá aktívna zložka hydrogenačných nosičových katalyzátorov), ale aj napriek týmto limitáciám je možné za určitých podmienok použiť metódu HR-CS GFAAS aj na stanovenie Ru v obidvoch uvažovaných prostrediach.

Poďakovanie: *Táto práca vznikla s podporou operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (projekt ITMS 26220220144 "Hydrogenácie v kvapalnej fáze").*

1Po35
ATOMIC FORCE MICROSCOPY OF POLYTHIOPHENE/FULLERENE COMPOSITE FILMS

D. Repovský[1], D. Velič[1,2]

[1]*Department of Physical and Theoretical Chemistry, Faculty of Natural Sciences, Comenius University, Mlynská dolina, Bratislava 842 15, Slovakia, repovsky@fns.uniba.sk*
[2]*International Laser Center, Ilkovičova 3, Bratislava 841 04, Slovakia*

Polythiophene amphiphilic block copolymers form complex arranged nano-structured films with potential for electronics, optoelectronics, biotechnology, etc. Topography of complex amphiphilic block polythiophene copolymer film on a glass surface was determined by using Atomic Force Microscopy (AFM). AFM shows that the method of sample preparation provides

different arrangement of a polythiophene domains on the glass surface. Polythiophene copolymer prepared by spin-coating formed relative homogeneous surface consists of polythiophene domains with terrace-like shape with thickness approximately 8 nm and its multiples. The domains are spatial oriented in one direction due to centrifugal force presented during this kind of sample preparation. Polythiophene domains prepared by drop-cast method provide absence of directional orientation of domains, and form massive solitary structures with approximate diameter 3 micrometers. Polythiophene domains have thickness approximately 8 nm and its multiples. Physical properties of amphiphilic block polythiophene copolymers can be enhanced by adding fullerene C_{60}. Composite Polythiophene/Fullerene film does not show significant change in the manner of the arrangement of the polythiophene copolymer on the glass surface, however domains show presence of C_{60} fullerene clusters with diameters of 100 and 20 nm. An apparent tendency is the higher overlap of the domains, caused by the presence of fullerene C_{60} clusters.

Key words: atomic force microscopy, amphiphilic block polythiophene copolymers, scanning near-field optical microscopy

1Po36
VLIV TENZIDŮ NA SORPCI NAFTOLOVÉ ZELENĚ B NA NEDOPALU

Lucie Ruppenthalová[1], Lucie Bartoňová[1]

[1]*Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava - Poruba, lucie_ruppenthalova@centrum.cz*

Cílem práce bylo studium vlivu surfaktantů na sorpci barviva Naftolové zeleně B (NZB) z vodného roztoku na dvou vzorcích nedopalu (vyseparovaných z ložových popelů při spalování uhlí). Sorpční experiment byl proveden ve vsádkovém uspořádání. Ke 150 ml roztoku barviva Naftolové zeleně B o výchozích koncentracích (44, 70 a 88 $mg.l^{-1}$) byla přidávána různá množství tenzidů Cetylpyridinium bromidu (CPB) a Hexadecyltrimethyl ammonium bromidu (HDTMAB) a 0,0375 g nedopalu. Po uplynutí kontaktní doby (10 dní) a následné centrifugaci byly pomocí UV-VIS spektroskopie stanoveny rovnovážné koncentrace Naftolové zeleně B.

Získaná data ukázala, že přidané množství tenzidů výrazně ovlivňuje adsorpční proces. S narůstajícím množstvím dávkovaného tenzidu byl ve všech případech pozorován nejprve výrazný nárůst v sorpci NZB na nedopal. Optimální množství každého z přidaných tenzidů do roztoku NZB bylo pro oba tenzidy srovnatelné - pohybovalo se okolo 10 $mg.g^{-1}$ (pro konc. NZB 70 $mg.l^{-1}$). Přídavek tohoto množství měl za následek až několikanásobné navýšení adsorpční kapacity NZB, přičemž tento nárůst byl výraznější v případě přídavku CPB než HDTMAB. Při přídavku HDTMAB byl sledovaný efekt méně výrazný. Se zvyšujícím se přídavkem tenzidů již docházelo k postupnému snižování naadsorbovaného množství NZB. Popsaný trend byl zjištěn jak pro oba nedopaly, tak i pro oba studované tenzidy.

Tato práce vznikla za podpory projektu Specifického vysokoškolského výzkumu č. SP2013/6.

1Po37
ETV-ICP-OES METÓDA PRI STOPOVEJ ANALÝZE NOSIČOVÝCH KATALYZÁTOROV NA BÁZE PD/C: ŠTÚDIUM VYPAROVANIA

Silvia Ružičková[1], Dagmar Remeteiová[1], Miroslava Smrčová[1], Miroslava Hámborská[1]

[1]*Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 042 00 Košice*
e-mail: silvia.ruzickova@tuke.sk

Jednou z najtypickejších redukčných metód využívaných v chémii je katalytická hydrogenácia, v procese ktorej je nevyhnutné použiť vhodný katalyzátor, pretože v prípade jeho absencie by daná reakcia vo väčšine prípadov vôbec neprebiehala. V praxi sú najčastejšie využívané nenosičové (Raney Ni) alebo nosičové katalyzátory na báze ušľachtilých kovov a to prevažne Pd, Pt, Rh a Ru. Bežne používanými nosičmi sú materiály s vysokou pórovitosťou (Al_2O_3, Fe_2O_3, SiO_2, ...), alebo uhličitany kovov alkalických zemín. Výkonnosť katalyzátorov limituje prítomnosť stopových prvkov (nečistôt), ktoré sa v procese ich výroby naviažu na aktívne miesta, čo v konečnom dôsledku môže viesť k významnému poklesu ich katalytickej aktivity. Poznať zloženie a obsah prímesových kovov v katalyzátoroch môže poskytnúť informáciu o ich vplyve na aktivitu účinnej zložky katalyzátora. Pre tento účel sa väčšinou využívajú roztokové spektrálne metódy (FAAS, ETAAS, ICP-OES) alebo XRF metóda. Táto práca, v zmysle princípov „zelenej chémie“, je zameraná na využitie priamej (bezrozkladovej) analýzy tuhých vzoriek (Solid Sampling) s využitím

metódy ETV-ICP-OES, pre prvkovú analýzu katalyzátorov. Bola zrealizovaná kvalitatívna analýza a následne sledované a vyhodnotené vyparovanie identifikovaných sprievodných prvkov v katalyzátoroch (Pd/C) formou normovaných vyparovacích kriviek, z ktorých boli určené polčasy vyparenia ($t_{50\%}$) a časy totálneho vyparenia prvkov ($t_{100\%}$).

Táto práca vznikla s podporou operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (projekt ITMS 26220220144 "Hydrogenácie v kvapalnej fáze").

Autori ďakujú grantovej agentúre VEGA, projekt. č. 1/0685/11, za finančnú podporu.

1Po38
OPTIMALIZÁCIA PRÍPRAVY BIOSENZORA NA DETEKCIU ETANOLU POUŽITÍM MIKROBIÁLNEHO BIONANOKOMPOZITU

Jana Šefčovičová[1], Jaroslav Filip[1], Peter Gemeiner[1], Ján Tkáč[1]

[1]*Oddelenie glykobiotechnológie, Chemický ústav, Centrum glykomiky, SAV, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovenská republika*
jana.sefcovicova@savba.sk

Hlavnými výhodami použitia celých buniek na prípravu biosenzorov sú: ľahká dostupnosť, schopnosť metabolizovať širokú škálu chemických zlúčenín, enzýmy sa nachádzajú vo svojom prirodzenom prostredí, potrebné koenzýmy a aktivátory sú prítomné v systéme [1]. Kombináciou s vhodným nanomateriálom je možné pripraviť biosenzor s vysokou citlivosťou a selektivitou voči danému analytu.

Na tento účel boli vybraté bunky *Gluconobacter oxydans* (*GbO*), ktoré obsahujú membránovo viazané dehydrogenázy schopné oxidovať široké spektrum látok vysokou rýchlosťou. Zmiešaním buniek s disperziou uhlíkových nanorúrok sa vytvoril bionanokompozit, ktorý sa využil na prípravu biosenzora na stanovenie etanolu s použitím ferrikyanidu draselného ako mediátora. Zariadenie bolo charakterizované skenovacou elektrónovou mikroskopiou (SEM) a hlavne pomocou elektrochemických techník [2].

Pred samotným použitím biosenzora na stanovenie etanolu v reálnych vzorkách, bolo potrebné optimalizovať spôsob jeho konštrukcie a následne charakterizovať základné parametre ako sú citlivosť, detekčný limit, operačná stabilita a čas odpovede. Dosiahnutá citlivosť biosenzora (162 ± 3 µA mM^{-1} cm^{-2}) bola najvyššia spomedzi doteraz publikovaných biosenzorových zariadení na detekciu etanolu. Biosenzor sa tiež vyznačoval krátkym časom odpovede a vysokou maximálnou prúdovou hustotou, čo ho predurčuje na ďalšie praktické využitie, napr. pri príprave biopalivových článkov.

*Príspevok bol vytvorený realizáciou projektu Centrum pre **M**ateriály, vrstvy a systémy pre **A**plikácie a **Ch**em**I**cké procesy v extrém**N**ych podmienk**A**ch na základe podpory operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja. Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0282-11.*

[1] Katrlík, J., Voštiar, I., Šefčovičová, J., Tkáč, J., Mastihuba, V., Valach, M., Štefuca, V., Gemeiner, P.: Anal. Bioanal. Chem. 2007, *388*, 287-295.
[2] Šefčovičová, J., Filip, J., Gemeiner, P., Vikartovská, A., Pätoprstý, V., Tkac, J.: Electrochem. Commun. 2011, *13*, 966-968.

1Po39
OPTIMALIZÁCIA PODMIENOK PREKONCENTRÁCIE VYBRANÝCH ŤAŽKÝCH KOVOV Z VODNÝCH ROZTOKOV S VYUŽITÍM UHLÍKOVÝCH NANORÚROK PRED ICH STANOVENÍM METÓDOU FAAS

Jana Semančíková[1], Dagmar Remeteiová[1]

[1]*Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 042 00 Košice, jana.semancikova@tuke.sk*

V laboratórnej praxi sa často stáva, že dostupná metóda na kvantitatívne stanovenie analytov vo vzorke (napríklad v prírodných kvapalných médiách) nie je postačujúca na zistenie stopových až ultrastopových obsahov prvkov s požadovanou presnosťou. V takýchto prípadoch je nutné do procesu analýzy zaradiť vhodne zvolenú metódu úpravy roztoku vzorky, resp. vody tak, aby bolo možné pôvodnou metódou stanoviť aj tie obsahy prvkov, ktoré sú pod jej hranicou dôkazu (LoD), resp. stanoviteľnosti (LoQ).

Jednou z vhodných metód úpravy roztoku vzorky pred jej samotnou analýzou je extrakcia tuhou fázou (Solid phase extraction – SPE). V súčasnosti je venovaná veľká pozornosť hľadaniu nových materiálov použiteľných v SPE ako tuhý sorbent. Práve uhlíkové nanorúrky (carbon nanotubes – CNTs) sú považované za nový vhodný materiál pre SPE sorbenty, vďaka ich dobrým fyzikálnym a chemickým vlastnostiam, ktoré zvyšujú separačnú a prekoncentračnú výkonnosť CNTs oproti ostatným bežným sorbentom (na báze silikagélu) využívaným v SPE.

Táto práca obsahuje vyhodnotenie experi–mentálnych podmienok (pH vzorky, obsah analytu, metóda použitá na oxidáciu sorbentu a množstvo CNTs tuhého sorbentu) SPE-CNT prekoncentrácie obsahov vybraných prvkov z vodných modelových roztokov.

Táto práca bola podporovaná projektom grantovej agentúry VEGA č. 1/0685/11.

1Po40
MODELING OF THE MIGRATION OF NANOPARTICLES FROM PACKAGING TO FOOD

Peter Šimon, Marian Valko

Institute of Physical Chemistry and ChemicalPhysics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia, peter.simon@stuba.sk

Nanoscience and nanotechnology grow explosively in the past few years. Since nanomaterials are applied worldwide, their safety, implications on human and environmental health and potential risks are under discussion where opinions range from "completely harmless and safe" to "extremely hazardous". The conflicting results about the nanotoxicity are due to the lack of standardized physicochemical characterisation of the different types of nanoparticles (NPs). Conceivable interactions of insoluble biopersistent nanoparticles with food matrix and living systems following from their physicochemical properties were assessed in our previous paper [1].

In this contribution, modeling of the migration of spherical nanoparticles from packaging to food is presented. The modeling is based on evaluation of the average distance travelled by NPs in the polymer matrix. The study has taken into account physicochemical properties of both NPs and packaging polymers. From the modeling, some general characteristics underpinning NPs migration can be predicted. The results indicate that any detectable migration of NPs from packaging to food will take place in the case of very small NPs with radius in the order of 1 nm, from polymer matrices that have a relatively low dynamic viscosity, and that do not interact with the NPs. These conditions are likely to be met in the case of nanocomposites of silver with polyolefines (LDPE, HDPE, PP). It can also be predicted that there will not be any appreciable migration in the case of bigger NPs, that are bound in polymer matrices with relatively high dynamic viscosity. Preliminary study on this topic has been published in [2].

Financial support from the Slovak Scientific Grant Agency, project VEGA 1/0856/11, is acknowledged (M. Valko).

[1] Šimon P. & Joner E., *J. Food Nutr.Res.*, 47 (2008) 51-59.
[2] Šimon P., Chaudhry Q. & Bakoš D., *J. Food Nutr.Res.*, 47 (2008) 105-113.

1Po41
VYUŽITIE STRIEBROM MODIFIKOVANÝCH TLAČENÝCH ELEKTRÓD PRE NEENZYMATICKÚ DETEKCIU CHOLESTEROLU

Lenka Škantárová[1], Renáta Oriňáková[1], Andrej Oriňák[1], Alfredo de la Escosura Muñiz[2], Arben Merkoçi[2]

[1]*Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, Skantarova.Lenka@gmail.com, renata.orinakova@upjs.sk, andrej.orinak@upjs.sk*
[2]*Nanobioelektronická a biosenzorická skupina, Katalánsky inštitút nanotechnológie, CIN2 (ICN-CSIC), 081 93 Bellaterra (Barcelona), Španielsko, alfredo.escosura@icn.cat, arben.merkoci@icn.cat*
Korešpondenčný autor: Skantarova.Lenka@gmail.com

V snahe rozvinúť analytické metódy, ktoré by odpovedali rastúcej potrebe uskutočniť rýchle "in-situ" analýzy, sa preukazujú jednorazové tlačené elektródy ako vhodná alternatíva voči tradičným elektródam. V súčasnosti je mnoho metód založených na použití elektrochemických technik, ku ktorých výhodám patrí vysoká citlivosť a selektívnosť, nízka cena a vyhovujúca veľkosť, umožňujúca ich prenos a možnosť pracovať s nimi i v teréne. Vyrobené tlačené elektródy možno pozmeniť vylúčením rozličných látok, akými sú kovy, nanoštrukturované povlaky, polyméry, enzýmy, ligandy na ich povrchoch [1].

Detekcia cholesterolu zohráva čoraz významnejšiu úlohu v oblasti biomedicíny a pri prevencii mnohých srdcovocievnych ochorení. Ampérometrické biosenzory, ktoré sú založené na prenose elektrónov medzi elektródou a imobilizovanou cholesteroloxidázou, predstavujú výhodný spôsob detekcie kvôli ich nízkym výrobným nákladom a jednoduchej manipulácii v reálnom čase. Nevýhodou pre enzymatické senzory je, že aktivita enzýmov s použitím senzora klesá a enzým ľahko degraduje [2].

Cieľom nášho výskumu bolo stanoviť cholesterol neenzymatickou reakciou na striebrom modifikovaných tlačených elektródach. Aktivita enzýmov môže byť ovplyvnená teplotou, pH, toxickými chemikáliami, preto je našou snahou vyvinúť senzor na detekciu cholesterolu s využitím Ag nanočastíc a bez enzýmu, a tak predísť problémom pri jeho použití. Ag modifikované elektródy ukázali lepšiu elektrokatalytickú aktivitu pri neenzymatickej oxidácii cholesterolu v porovnaní s nemodifikovanými elektródami.

Autori ďakujú za finančnú podporu Vedeckej a grantovej agentúre Ministerstva školstva SR (1/0211/12).

[1] Olga Domínguez Renedo, M. Asunción Alonso-Lomillo, M. Julia Arcos Martínez, Talanta 73, (2007), 202 – 219.
[2] Yanfen Li, Hongyan Bai, Qian Liu, Jianchun Bao, Min Han, Zhihui Dai, Biosensors and Bioelectronics 25, (2010), 2356 – 2360.

1Po42
VLIV REDOX POTENCIÁLU NA ODSTRAŇOVÁNÍ MĚĎNATÝCH IONTŮ POMOCÍ NANOČÁSTIC KOVOVÉHO ŽELEZA

Petr Slovák[1], Jan Čuda[1], Šárka Hradilová[1], Jan Filip[1], Karolína Machalová Šišková[1], Radek Zbořil[1]

[1]Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17.listopadu 12, 77146 Olomouc, Česká republika

Nanočástice kovového železa (dále „nZVI“ podle anglického termínu „nanoscale Zero-Valent Iron“) se často testují pro použití v environmentálních technologiích. Zejména kationty těžkých kovů představují skupinu nebezpečných polutantů v odpadních, povrchových i podzemních vodách a tento typ znečištění může být vhodně odstraňován právě pomocí nZVI [1]. Bylo definováno několik mechanismů odstranění kationtů těžkých kovů pomocí nZVI: sorpce, redukce, zabudování do struktury sekundárních oxidů Fe, tvorba samostatné fáze či kombinace těchto procesů. V této práci byl jako modelový systém zvolen vodný roztok Cu^{2+}. Po přídavku nZVI k vodnému roztoku Cu^{2+} byla koncentrace Cu^{2+} během několika minut snížena zhruba na 1% počáteční koncentrace (v závislosti na poměru Cu^{2+} : nZVI). Následně byl pozorován opětovný pomalý nárůst koncentrace Cu^{2+} ve sledovaném roztoku (kolem 60% původní koncentrace Cu^{2+} během 24 hohin a 90% během 90 hodin od začátku experimentu). Nárůst koncentrace Cu^{2+} byl pozorován pouze v případě, kdy byl reakční roztok v kontaktu se vzduchem a zjištěný trend v koncentraci Cu^{2+} koresponduje s pozorovanými změnami v redox potenciálu během reakce. Detailní mechanismus této reakce bude diskutován v příspěvku. Dosažené výsledky naznačují slibné použití nZVI k odstraňování Cu^{2+} z kontaminovaných podzemních vod, avšak poukazují na možné omezení v případě purifikace povrchových a odpadních vod kontaminovaných Cu^{2+}.

Práce vznikla za finanční podpory projektů Vzdělávacího Operačního Programu pro Konkurenceschopnost – Evropské sociální fondy (CZ.1.07/2.3.00/20.0155) a Technologické Agentury České republiky “Centra Kompetence” (TE01020218).

[1] Xiao-qin Li and Wei-xian Zhang: *J. Phys. Chem. C* 111 (2007) 6939–6946.

1Po43
FORENZNÉ STOPY STRELIVÍN NA ODTLAČKOCH PRSTOV V HMOTNOSTNÝCH SPEKTRÁCH

Lenka Slušná[1], Dušan Velič[1,2], Monika Stupavská[2]

[1]Univerzita Komenského, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, 842 15, Bratislava, slusnal@gmail.com
[2]Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3, 812 19 Bratislava

Forenzná veda je moderná, stále sa rozvíjajúca vedná disciplína, ktorá využíva fyzikálne a chemické metódy k odhaľovaniu trestnej činnosti. Cieľom práce bolo chemicky charakterizovať a odlíšiť čistý odtlačok prsta od odtlačku prsta kontaminovaného pušným prachom. Na analýzu sme využili metódu hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov (SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry)), pri ktorej sú emitované atomárne a molekulové ióny bombardovaním povrchu pevnej látky vysoko-

energetickými primárnymi iónmi [1].V analyzovanej vzorke odtlačku prsta metódou SIMS sme zistili prítomnosť vody, močoviny, kyseliny mliečnej, cholesterolu, minerálnych látok, aminokyselín, lipidov a esterov, z ktorých sa skladá pot a kožný maz. Pri porovnaní odtlačku prsta kontaminovaného pušným prachom a čistého odtlačku prsta sme našli fragmenty nitroglycerínu (($C_3H_6O_9N_3^+$), M = 228 m/z ,($C_4H_8O_9N_3^+$), M = 242 m/z, ($C_5H_8O_9N_3^+$), M = 254 m/z), 1,3- dietyl 1,3-difenyl močoviny (($C_8H_{10}N^-$)), M = 120 m/z) a sulfidu antimonitého ((S^-), M = 32 m/z) [2]. Tieto látky sa nachádzajú v pušnom prachu, stabilizačných látkach streliva alebo rozbuške, čím sme jednoznačne dokázali prítomnosť strelivín na odtlačku prsta.

Vďaka vysokej citlivosti môžeme metódou hmotnostnej spektrometrie sekundárnych iónov odhaliť prítomnosť streliva aj pri nízkych koncentráciách a preto sa táto metóda javí ako vhodná na analýzu strelivín.

Táto práca bola podporená grantmi NANONET 2 a meta – QUTE – Centrum excelentnosti kvantových technológií.

[1] Lőrinčík, J., Bastl, Z., Šroubek, Z., Hmotnostní spektrometrie sekundárních iontů. Praha: Academie, 2002, str. 147- 201, ISBN 80-200-0594-3

[2] Slušná, L. 2013. Forenzné stopy strelivín na odtlačkoch prstov v hmotnostných spektrách. Bakalárska práca. Bratislava : PrifUK, 2013. 33 s.

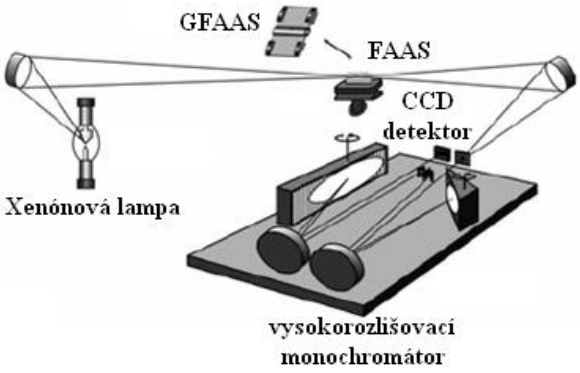
1Po44
VYUŽITIE HR-CS AAS V ANALYTICKEJ KONTROLE RECYKLÁCIE VYBRANÝCH HYDROGENAČNÝCH KATALYZÁTOROV

Miroslava Smrčová[1], Dagmar Remeteiová[1], Silvia Ružičková[1]

[1] *Technická univerzita v Košiciach, Hutnícka fakulta, Katedra chémie, Letná 9, 042 00 Košice, miroslava.smrcova@tuke.sk*

V hydrogenačných reakciách je, pre dosiahnutie požadovanej selektivity a výťažnosti konkrétnej reakcie, nevyhnutné použitie efektívneho katalyzátora. Na tieto účely sú často používané nosičové katalyzátory s ušľachtilými kovmi ako aktívnou zložkou. V priebehu reakcie môže dôjsť k úniku aktívnej zložky do reakčnej zmesi, čoho následkom je pokles špecifickej aktivity katalyzátora. Pri analytickej kontrole účinnosti heterogénnej katalýzy nachádza široké uplatnenie metóda AAS s vysokým rozlíšením a kontinuálnym zdrojom žiarenia (HR-CS AAS), pričom predstavuje pre túto oblasť významný prínos najmä pri hodnotení strát kovov z nosičových katalyzátorov počas hydrogenačných testov. ContrAA® 700 (prototyp nového HR-CS AAS spektrometra) okrem iného disponuje: vysoko rozlišovacím monochromátorom, jediným zdrojom žiarenia, možnosťou rýchlej zmeny z techniky FAAS na GFAAS (Obr. 1) a sekvenčnej a simultánnej viacprvkovej analýzy. Technika GFAAS, vzhľadom na svoju hranicu dôkazu na úrovni ppb, je vhodná pre stanovenie aktívnej zložky katalyzátora uvoľnenej do reakčnej zmesi.

Práca obsahuje výsledky optimalizácie teplotného programu (teploty pyrolýzy a atomizácie) pri stanovení Pd (aktívnej zložky) a Fe, Cu a Ni (prímesových súčastí) reakčnej zmesi po hydrogenácii nitrobenzénu na anilín metódou HR-CS GFAAS. Optimalizačné štúdie boli uskutočnené na modelových roztokoch kovov v anilíne s prídavkom vody alebo 50 % etanolu na elimináciu nepriaznivých vplyvov anilínu na materiál kyvety a dávkovacej kapiláry.



Obr. 1 Experimentálne usporiadanie HR-CS AAS

Poďakovanie: *Táto práca vznikla s podporou operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (projekt ITMS 26220220144 "Hydrogenácie v kvapalnej fáze").*

1Po45
CHARAKTERIZACE UHLÍKATÝCH MATERIÁLŮ NA BÁZI CELULÓZY PROSTŘEDNICTVÍM ADSORPCE TĚŽKÝCH KOVŮ Z VODNÉ FÁZE

Jana Štefelová[1]

[1]*Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta, Ostravská Univerzita v Ostravě, 30. dubna 22, 701 03 Ostrava, S.Jeanne@seznam.cz*

Aerogely a kryogely z celulózy jsou lehké, porézní materiály s nízkou hustotou. Díky svým vlastnostem a faktu, že jsou vyráběny z obnovitelného zdroje, se mohou uplatnit například jako izolanty, nosiče katalyzátorů nebo ve farmaceutickém průmyslu [1].

Tato práce je zaměřena na charakterizaci materiálů na bázi celulózy pomocí studia adsorpce těžkých kovů z vodných roztoků. Byly připraveny dva typy uhlíkatých materiálů z celulózy a jejího acetátu. Celulóza byla rozpuštěna v hydratované tavenině thiokyanatanu vápenatého [2], acetát celulózy byl rozpuštěn v acetonu, s následným přidáním katalyzátoru a síťovadla PMDI [3]. Vzniklé gely byly louhovány v destilované vodě, sušeny mrazovou sublimací a pyrolyzovány v proudu dusíku.

Pro studium adsorpčního chování byly připraveny roztoky Cd^{2+} a Zn^{2+} iontů v koncentraci 0,1 – 1 mmol l^{-1}. Experimenty byly provedeny vsádkově v malém množství, kdy k 10 mg vzorku bylo přidáno 10 ml roztoku dané koncentrace těžkého kovu. Ze získaných adsorpčních izoterem byla vypočtena maximální adsorpční kapacita. Pro kryogel z acetátu celulózy byla a_{max} pro Cd^{2+} ionty přibližně 0,38 mmol g^{-1}, materiál z celulózy vykazoval a_{max} vyšší než 0,4 mmol g^{-1} . V případě adsorpce Zn^{2+} iontů vykazovaly oba materiály srovnatelnou hodnotu a_{max}, která byla vyšší než 0,3 mmol g^{-1}.

Tato práce byla podpořena z projektu „Institut environmentálních technologií“, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 a také prostřednictvím SGS reg. č. SGS02/PřF/2013, Ostravská univerzita v Ostravě.

[1] Warut Surapolchai, David A. Schiraldi: Polym. Bull. 65 (2010) 951 – 960
[2] Sandra Hoepfner, Lorenz Ratke, Barbara Milow: Cellulose 15 (2008) 121 – 129
[3] Bartosz Grzyb, Claudia Hildenbrand, Sandrine Berthon-Fabry, Dominique Bégin, Nathalie Job, Arnaud Rigacci, Patrick Achard: Carbon 48 (2010) 2297 – 2307

1Po46
CHARACTERIZATION AND SURFACE-ENHANCED RAMAN SPECTRAL TESTING OF ACTIVES SURFACES BASED ON CHLORIDE-MODIFIED AG NANOPARTICLES

Veronika Sutrová[1], Ivana Šloufová[1], Blanka Vlčková[1]

[1)]*Department of Physical and Macromolecular Chemistry*, Charles University in Prague, *Hlavova 8, Prague 2, 128 40, Czech Republic, veronika.sutrova@volny.cz*

Two types of hydrosols of silver nanoparticles (AgNPs) modified by the addition of HCl were compared and tested. AgNPs hydrosols were prepared by reduction of $AgNO_3$ by either $NaBH_4$ (BH-AgNP hydrosol), or $NH_2OH{\cdot}HCl$ (HA-AgNP hydrosol). Their SERS (surface-enhanced Raman scattering) activity was tested by measuring the SERS or SERRS (surface-enhanced resonance Raman scattering) of 2,2´-bipyridine (bpy) and 5,10,15,20-Tetrakis(1-methyl-4-pyridyl)-21H,23H-porphine (H_2TMPyP) testing adsorbates and by determining of their SERS and SERRS spectral detection limits at λ_{exc} = 532 nm. The active systems were characterized by SPE (surface plasmon extinction) spectra and transmission electron microscopy. For both types of AgNPs hydrosols, it was found, that addition of HCl and testing adsorbate leads to an intergrowth of AgNPs and to the formation of their compact aggregates, in combination with the formation of new adsorption sites. The limit of detection of bpy was $1{\cdot}10^{-9}$ M in the system BH-AgNP hydrosol/HCl/bpy and $1{\cdot}10^{-8}$ M in the system BH-AgNP hydrosol/HCl/bpy. The limit of detection of H2TMPyP was the same in both systems and its value was $1{\cdot}10^{-7}$ M. The reason for this is probably a signal loss caused by a partial sedimentation of aggregates from the active system.

1Po47
STUDY OF Ge-As-Se CHALCOGENIDE GLASSES USING LASER DESORPTION IONISATION TIME-OF-FLIGHT MASS SPECTROMETRY

Katarína Švihlová[1], Lubomír Prokeš[1,2,3], Milan Alberti[2,3], Petr Němec[4], and Josef Havel[1,2,3]

[1] Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Kamenice 5/A14, 62500 Brno, Czech Republic, ursonka@gmail.com
[2] Department of Physical Electronics, Faculty of Science, Masaryk University, Kotlářská 2, 61137 Brno, Czech Republic
[3] CEPLANT, R&D Centre for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications, Masaryk University, Kotlářská 2, 61137 Brno, Czech Republic
[4] Department of Graphic Arts and Photophysics, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 53210 Pardubice, Czech Republic

Chalcogenide glasses are advanced materials with many applications in the field of infrared optics and electronics. The Ge-As-Se system belongs to group of glasses which are distinguished from other materials by large glass-forming region as well as tuning their photosensitivity/photostability. The glasses and amorphous thin films from Ge-As-Se system were already studied via several methods [1, 2], however the plasma chemistry which is of high importance for thin films growth via plasma techniques is not understood yet.

Therefore, in this work Ge-As-Se glasses were manufactured and their interaction with high energy laser pulses was studied using laser desorption ionisation time-of-flight mass spectrometry. It was shown in previous papers [3, 4] that clusters ablated from the solid glass posses to a certain extend part of the original structure and thus information about the structural patterns of solid glass can be obtained.

The spectra are quite complex and often result of several clusters overlap. Because germanium always contains some hydrogen, $Ge_mAs_nSe_o$ clusters observed are overlayed with hydrogenated $Ge_mAs_nSe_oH_x$ species. The stoichiometry was proposed analysing isotopic envelopes and via computer modeling with respect to composition of original chalcogenide glasses.

[1] C. J. Zha, R. P. Wang, A. Smith, A. Prasad, R. A. Jarvis and B. Luther-Davies. J. Mater. Sci. Mater. Electron. 18 (S1), S389-392 (2007).
[2] R. P. Wang, A. V. Rode, D. Y. Choi and B. Luther-Davies. J. Appl. Phys. 103 (8), 083537 (2008).
[3] [3] S. D. Pangavhane, P. Němec, T.Wagner, J. Janča, J. Havel. Rapid Commun. Mass Spectrom, 24, 2000–2008 (2010).
[4] S. D. Pangavhane, J. Houška, T. Wágner, M. Pavlišta and J. Havel. Rapid Commun. Mass Spectrom., 24, 95-102 (2010).

1Po48
POROVNÁVACIE ŠTÚDIUM BOROM-DOPOVANÉHO DIAMANTU S INÝMI UHLÍKOVÝMI MATERIÁLMI PRE IMOBILIZÁCIU DNA

Jana Svítková, Ľubomír Švorc a Ján Labuda

Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská Technická Univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovenská republika
jana.svitkova@stuba.sk

Nový elektródový materiál - bórom dopovaný diamant (BDD)- samotný diamant sa vyznačuje mimoriadnou mechanickou aj chemickou stabilitou. Na jeho elektroanalytické využitie je nutné ho dopovať atómami iných prvkov, najčastejšie atómami bóru [1]. V štúdiu sa zameriavame na uplatnenie BDD elektródy pre naviazanie DNA na povrch elektródy. Uhlíkové nanorúrky patria k známym materiálom významne zlepšujúcim elektrickú vodivosť a chitozán k prostriedkom zabezpečujúcim stabilitu imobilizácie DNA [2,3].

Všetky voltampérometrické merania sa uskutočnili pomocou elektrochemického analyzátora AUTOLAB PGSTAT 302N (EcoChemie, Holandsko). V trojelektródovom zapojení bola pracovná elektróda

(4 elektródy) BDD s priemerom filmu 3 mm (Windsor Scientific, Veľká Británia), CE, GCE, alebo SPCE, platinový drôtik ako pomocná elektróda, argentochloridová Ag/AgCl/3 mol l^{-1} KCl referenčná elektróda.

V prvom kroku bola optimalizácia podmienok merania, merací potenciálový rozsah elektród pomocou cyklickej voltampérometrie 1.10^{-3} mol l^{-1} $[Fe(CN)_6]^{3-/4-}$. Povrchy elektród sa modifikovali nanesením malého objemu roztoku SWCNT-COOH a zaschnutím alebo nanesením roztoku DNA, pričom sa vrstva DNA nechala schnúť počas noci a na tmavom mieste. Rovnako sa pripravili elektródy modifikované vrstvou SWCNT-COOH a po zaschnutí aj vrstvou DNA.

BDDE je elektródou, ktorá samotná poskytuje reverzibilný obraz depolarizátora, ale je aj vhodná na modifikáciu s SWCNT-COOH a imobilizáciu DNA. Je možné ju obnoviť aj po nanesení DNA, čo opäť v prípade často používanej SPCE nie je možné.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0797-11. Autori ďakujú za podporu Vedeckej grantovej agentúre VEGA MŠ SR a SAV (projekt č. 1/0182/11 a 1/0051/13) a Programu na podporu mladých výskumníkov.

[1] Yosypchuk B., Barek J.: Crit. Rev. Anal. Chem. *39*, 189 (2009)
[2] Galandová J., Ziyatdinova G., Labuda J.: Anal. Sci. *24*, 711 (2008)
[3] Ambrózy A., Hlavatá L., Labuda J.: Acta Chimica Slovaca, In Press.

1Po49
ČASOVO ROZLÍŠENÁ FEMTOSEKUNDOVÁ SPEKTROSKOPIA KOMPLEXU KUMARÍN/CYKLODEXTRÍN

Marianna Trenčanová[1], Dušan Velič[1,2]

[1]Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Mlynská dolina, Bratislava, 845 45, Slovenská republika
[2]Medzinárodné laserové centrum, Ilkovičova 3,841 04 Bratislava

Práca sa zameriava na štúdium cyklodextrínových derivátov so zameraním na popísanie ich fyzikálnochemických vlastností ako sú hlavne polarita rôznych častí molekuly a jej vplyv na relaxáciu fluorescenčného farbiva – kumarínu c153. Cyklodextríny sú cyklické oligosacharidy D-glukopiranózy spojenej α-1,4 -glykozidovou väzbou.

Výnimočnosť týchto molekúl spočíva v tom, že v dôsledku orientovaných hydroxylových skupín je vnútorná časť molekuly nepolárna a vonkajšia časť molekuly, je polárna. V dôsledku týchto vlastností je molekula veľmi často používaná ako prenášač nepolárnych látok v polárnom prostredí [1].

Boli vytvorené supramolekulové komplexy zložené z β-cyklodextrínu (BCD) a kumarínu c153 vo vodnom prostredí [2].V práci sme použili statickú fluorescenčnú spektroskopiu, pomocou ktorej sme vypočítali Stokesov posun pre jednotlivé systémy BCD 5600-6000 cm^{-1}. polytiolovaný (PT) BCD 5800-5300 cm^{-1}, monotiolovaný (MT) BCD 5500-5600 cm^{-1} a polysilylovaný (PS) BCD 5600-4400 cm^{-1} s narastajúcou koncentráciou cyklodextrínu. Pomocou časovo rozlíšenej spektroskopie sme pozorovali relaxáciu excitovaných elektrónov v daných komplexoch (obr. 1). Rozdiely v časoch a posunoch jasne dokazujú zmenu solvatačných podmienok c153 a teda zmenu tvorby supramolekulových komplexov.

	Dĺžka sledovanej relaxácie	**t1 [ps]**	**t2 [ps]**
c153/voda	50 ps	3-6	172-200
	5 ps	0,4-2,2	24-80
c153/BCD	50 ps	1-50	76-150
	5 ps	0,25-4	15-80
c153/PS	50 ps	8,3-9	152-185
	5 ps	1-3,2	32-60
c153/PT	50 ps	0,5-51	149-400
	5 ps	0,1-1,5	5-80
c153/MT	50 ps	0,6-1,3	147-200
	5 ps	0,3-0,7	15-26

Obr. 1 Porovnanie relaxačných časov pre jednotlivé systémy a jednotlivé časové úseky od excitácie

Táto publikácia bola vytvorená realizáciou projektov ERDF OP R&D, meta-QUTE– Centrum excelentnosti kvantových technológií, APVV-0491-07 a VEGA 1/0522/10, VEGA 1/0437/10, NanoNet2

[1] Douhal, A. Cyclodextrin Materials Photochemistry, Photophysics and Photobiology, (2006)
[2] Velič D., Köhler G., Chemical Physics Letters, 371, 483 (2003)

1Po50
STANOVENÍ Ag VE VZORCÍCH POPELA FOTOGRAFICKÉHO FILMU METODOU FL-AAS

Iva Urbanová[1], Lenka Husáková[1], Pavla Židová[1], Tomáš Kratochvíl[2], Jitka Šrámková[1]

[1]Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573 – HB/D, 532 10 Pardubice, Česká Republika, urbanova.iva@email.cz
[2]Ústav environmentálního a chemického inženýrství,Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573 – HB/D, 532 10 Pardubice, Česká Republika

Byla vypracována metoda pro stanovení Ag v popelu fotografického filmu (FOMA Bohemia spol. s. r. o., Česká Republika) metodou atomové absorpční spektrometrie s atomizací v plameni

(FL-AAS) za využití přímého dávkovaní suspenzí. Navržená metoda představuje jednoduchou, rychlou a ekonomicky výhodnou alternativu ke standardním postupům založeným na mineralizaci na mokré či suché cestě umožňující monitorování obsahu Ag ve fotoodpadu v průběhu procesu jeho regenerace. Studován byl vliv přítomnosti dispergačního a extrakčního média, navážky vzorku a doby ultrazvukování na výsledky analýzy, určena byla limitní koncentrace suspenze a kvantifikován vliv interference matrice na stanovení. Pozornost byla věnována rovněž optimalizaci postupu mikrovlnné mineralizace vzorku a byly určeny analytické charakteristiky navržené metody. Správnost metody byla ověřena porovnáním výsledků získaných přímou analýzou suspenzí s daty obdrženými po mikrovlnné mineralizaci a pomocí metody LIBS (spektrometrie laserem indukovaného plazmatu). Navržená metoda umožňuje stanovení jak celkového obsahu Ag ve vzorku, tak i stanovení Ag přítomného v elementární formě (Ag^0) a stříbra vázaného ve formě halogenidu (Ag^I).

Autoři děkují interní grantové agentuře Univerzity Pardubice, projekt č. SGFChT06/2013 za finanční podporu.

1Po51
DUÁLNÍ SENZOR PRO STANOVENÍ BIOLOGICKY VÝZNAMNÝCH ANIONTŮ

Jakub Vaněk[1,2], Přemysl Lubal[1,2], Petr Hermann[3], Iveta Pilařová[1], Libuše Trnková[1,4]

[1]*Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita, Kotlářská 2, 611 37 Brno, Česká Republika, vanekjakub@gmail.com*
[2]*Středoevropský technologický institut (CEITEC), Masarykova Univerzita, Kamenice 5, 625 00 Brno, Česká republika*
[3] *Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 40 Praha 2, Česká republika*
[4]*Středoevropský technologický institut (CEITEC), Vysoké učení technické v Brně, Technická 3058/10, 616 00 Brno, Česká republika*

Specifické spektroskopické, elektrochemické a magnetické vlastnosti činí z Ln(III) iontů ideální kandidáty pro využití v mnoha různých chemických, biologických a environmentálních systémech. Ln(III) komplexy s makrocyklickými ligandy (zejména deriváty DOTA) jsou hojně využívány v lékařské chemii jako kontrastní látky v MRI (Gd) a luminiscenční sondy (Eu, Tb, Yb, Nd ve VIS a NIR oblasti). DO2A (1,4,7,10-tetraazacyklododekan-1,7-dioctová kyselina) a DO3A (1,4,7,10-tetraazacyklododekane-1,4,7-trioctová kyselina) jsou hexa- a heptadentátní ligandy tvořící velmi stabilní komplexy s Ln(III) ionty, kde jsou tři, resp. dvě koordinační místa obsazena molekulami vody. Tyto komplexy tvoří ternární komplexy s malo-objemnými mono- a bidentátními ligandy (např. fluorid, octan, fosforečnan, šťavelan, uhličitan, aj.), a proto bylo navrženo použití uvedených komplexů jako citlivých senzorů pro stanovení těchto aniontů. Byl vyvinut citlivý luminiscenčně-elektrochemický senzor na bázi ternárních komplexů [Ln(DO3A)(L)] and [Ln(DO2A)(L)] (Ln = Eu, Tb, L = pikolinát, isochinolinát) pro stanovení uhličitanu a dalších relevantních aniontů v potenciálních biologických vzorcích a komplikovaných matricích [1].

Tato práce byla podporována Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České Republiky (ME09065, MUNI/A/0992/2009; MSM002162085; KONTAKT II (LH 13053)), Grantovou agenturou České Republiky (grant 13-08336S) a OPVK projektem (NanoBioMetalNet) CZ.1.07/2.4.00/31.0023 a provedena v rámci EU programů CEITEC CZ.1.05/1.1.0/02.0068.

[1] Vaněk J., Lubal P., Hermann P., Anzenbacher P., Jr., J. Fluorescence 23 (2013) 57

1Po52
SLEDOVÁNA ORGÁNOVÉ DISTRIBUCE NANOČÁSTIC STŘÍBRA POMOCÍ ICP-MS

Lenka Veverková[1], Šárka Hradilová[2], David Milde[1]

[1]*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra analytické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, lenka.veverkova@upol.cz*
[2]*Regionální centrum pokročilých technologií a materiálů, Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika*

Nanočástice stříbra (AgNPs) jsou v současné době jedním z nejčastěji používaných nanomateriálů ve spotřebitelských produktech. Stříbro ve formě iontů Ag^+ má antimikrobiální vlastnostni a toxické účinky pro mnoho patogenů, včetně bakterií, virů a houby. Vzhledem k jeho relativně nízké toxicitě pro lidi se stříbro používá v různých lékařských aplikacích [1]. Antibakteriální aktivita AgNPs také závisí na Ag^+ iontech, které jsou tvořeny na povrchu nanočástic v důsledku reakce s kyslíkem. Obecně platí, že

použití nanočástic ve výrobcích týkající se potravin a nápojů je stále vzácné [2].

Naše studie zkoumala distribuci stříbra po podání stříbra ve formě nanočástic (AgNPs) myším [3]. Byla sledována orgánová distribuce AgNPs. Kromě játer, byly největší koncentrace stříbra zjištěny ve slezině a v ledvinách. Stříbro bylo také nalezeno v plicích a mozku. Další studie jsou však zapotřebí k získaní dalších informací o transportu do orgánů a tkání.

Koncentrace stříbra byla zjišťována za pomocí ICP-MS Agilent 7700x HMI. Před měřením byly vzorky rozloženy pomocí koncentrované kyseliny dusičné v mikrovlnném rozkladném systému při vyšší teplotě a tlaku.. Nejprve jsme optimalizovali rozklad vzorků a měření stříbra pomocí ICP-MS na modelových vzorcích. Následně jsme si tyto metody ověřili na referenčním materialu tkáně humra (LUTS-1). Optimalizované metody jsme použili pro měření reálných vzorků.

Finanční podpora od Operačního programu Výzkum a vývoj pro inovace CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a Úprava vzorku při analýze složitých matric PrF_2013_030 je velmi oceňována.

[1] Hansen SF, Michelson ES, Kamper A, Borling P, Stuer-Lauridsen F, Baun A: Ecotoxicology, 17, 438 (2008)
[2] Lok CN, Ho CM, Chen R, He QY, Yu WY, Sun H, et al: Journal of Biological Inorganic Chemistry, 12, 527 (2007)
[3] Loeschner et al.: Particle and Fibre Toxicology, 8, 18 (2011)

1Po53
FUNKČNÉ STRIEBORNÉ NANO–ŠTRUKTÚROVANÉ POVRCHY PRE VYUŽITIE V SENZOROCH

Zuzana Orságová Králová[1], Andrej Oriňák[1], Renáta Oriňáková[1], Lenka Škantárová[1], Jozef Radoňák[2]

[1]*Katedra fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Pavla Jozefa Šafárika, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, Skantarova.Lenka@gmail.com, renata.orinakova@upjs.sk, andrej.orinak@upjs.sk*
[2]*I. chirurgická klinika Univerzitnej nemocnice L. Pasteura, Trieda SNP 1, 04011 Košice, Slovenská republika,*
Korešpondenčný autor: orsagova.kralova@gmail.com

Strieborné nanoštruktúrované povrchy predstavujú vhodný substrát pre aplikáciu v senzoroch a na detekciu biologických vzoriek s uplatnením v medicíne. Elektrochemická depozícia predstavuje jednoduchý a lacný spôsob ich prípravy. Problémom stále ostáva homogenita povrchu a s ňou spojená reprodukovateľnosť výsledkov analýzy. Dá sa eliminovať použitím templátov alebo detailnou optimalizáciou podmienok elektrochemickej prípravy nanoštruktúrovaných povrchov. To predstavuje hlavný cieľ výskumu. Jednotlivé Ag nanoštruktúrované povrchy boli pripravené metódou pulzného vylučovania s rôznym počtom pulzov (75, 100 a 125). Sledovaný bol aj vplyv procesu leštenia pracovnej elektródy z ušľachtilej ocele na morfológiu vylúčeného nanoštruktúrovaného povrchu. Povrchy boli pripravené pre analýzu hlavných komponentov krvného séra, albumínu a globulínu. Tieto proteíny sú možnými nositeľmi informácie o prítomnosti rakovinového ochorenia u pacienta na základe odlišných sekvencií aminokyselín v ich štruktúre. Ako modelové štandardy na štúdium zosilnenia analytického signálu povrchom boli použité: 4 – aminotiofenol, rodamín 6G a fluoresceín. Všetky modelové analyty boli na strieborných povrchoch úspešne identifikované Ramanovým spektrom. Bolo dosiahnuté niekoľkonásobné zosilnenie analytického signálu. V budúcnosti sa počíta s aplikáciou nanoštrukturovaného striebra na vodivé sklo, následne na aplikáciu v senzore a priamu a rýchlu detekciu rakovinových ochorení z reálnych krvných vzoriek.

Autori ďakujú za finančnú podporu Vedeckej a grantovej agentúre Ministerstva školstva SR (1/0211/12) a VEGA-1/0592/13, granty CEEPM-ITMS 26220120067 Centrum excelencie.

POSTERY - SEKCIA 2
ANORGANICKÁ A MATERIÁLOVÁ CHÉMIA

2Po01
DISKONTINUÁLNÍ TITRACE

Mgr, Rostislav Adam[1] , Ing. Barbora Drtinová, PhD.[1], doc. Ing. Karel Štamberg, CSc.[1]

[1]České vysoké učení technické v Praze, Břehová 7, Praha 1, 115 19

Určení parametrů vazebných míst jílových minerálů se provádí acidobazickými titracemi.

Jak dlouhý kontakt minerálu s kapalnou fází je potřeba, aby došlo k ustavení rovnováhy? Existují metodiky částečně kontinuálního charakteru, které počítají se splněním určitého parametru. V případě, že je tento požadavek splněn, předpokládají tyto metody, že systém dosáhl rovnováhy a může být přidána další kapka kyseliny nebo zásady. Kupříkladu metodika dle Wannera předpokládá, že rozdíl elektrochemického potenciálu po 10 minutách oproti potenciálu po 5 minutách nesmí přesáhnout 2 mV. [1]

Na základě posledních prací se tyto požadavky nejeví jako postačující. Z toho důvodu se přechází ke statické metodě, založené na dlouhodobém kontaktu minerálu s roztokem obsahujícím definované množství kyseliny nebo zásady.

V této studii byl pro zjištění vhodné doby kontaktu použit Bentonit B75 upravený dle Wannera. Jako kontaktní roztok určující současně hodnotu iontové síly byl použit 0,1 M $NaNO_3$. Titračními činidly byly 0,1 M roztoky HNO_3 a NaOH. Ustavování rovnováhy po přídavku jednotlivé dávky titračního činidla probíhalo po dobu: 3 hodin, týdnu, 14 a 19 dnech. Zjistili jsme, že ani týden není dostatečná doba pro ustavení rovnováhy.

Výsledky budou prezentovány na 65.Sjezdu Chemiků.

[1] Wanner, H.; Albinsson, Y.; Karnland, O.; Wieland, E.; Wersin, P.; Charlet, L.: Radiochimica Acta 66/67, 157-162(1994)

2Po02
VLIV ZPŮSOBU PŘÍPRAVY NA BAREVNOST PEROVSKITOVÝCH PIGMENTŮ NA BÁZI DOPOVANÉHO $SRSNO_3$

Lucie Adolfová, Žaneta Dohnalová, Petra Šulcová, Aneta Burkovičová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 53210 Pardubice, lucie.adolfova@student.upce.cz

Cílem této práce bylo ověřit různé způsoby přípravy pigmentů typu $SrV_xTb_ySn_{1-(x+y)}O_{3\pm\delta}$ a porovnat získané výsledky z hlediska jejich vlivu na barevné vlastnosti pigmentů. Sloučeniny na bázi $SrSnO_3$ jsou barevně zajímavé vysokoteplotní pigmenty, jejichž podstatou je termicky stabilní hostitelská mřížka cíničitanu strontnatého, do níž jsou vnášeny ionty chromoforů. Barva tohoto typu sloučenin souvisí s včleňováním kationů oxidů (V_2O_5 a Tb_4O_7) do mřížky $SrSnO_3$. Výchozími surovinami k přípravě pigmentů typu $SrV_xTb_ySn_{1-(x+y)}O_{3\pm\delta}$ jsou kromě uhličitanu strontnatého ($SrCO_3$) také oxid cíničitý (SnO_2), oxid vanadičný (V_2O_5) a oxid terbia (Tb_4O_7). Výsledný barevný odstín pigmentů pak závisí na obsahu jednotlivých složek a teplotě kalcinace. Pro syntézu vzorků byla použita keramická metoda, metoda suspenzního mísení surovin a mechanoaktivace. Připravené reakční směsi byly podrobeny dvoustupňové kalcinaci, nejprve při teplotě 1000 °C (2h), ve druhém stupni pak při teplotách 1300 až 1500 °C (3h).

Takto připravené pigmenty byly podrobeny studiu základních pigmentově-aplikačních vlastností. Vzorky byly aplikovány do organického pojiva a u těchto aplikací byly hodnoceny koloristické vlastnosti (ColorQuest XE, HunterLab, USA), dále byla u práškových pigmentů měřena velikost jejich částic (Mastersizer 2000/MU, Malvern Instruments Ltd., VB) a také bylo ověřováno fázové složení připravených sloučenin pomocí rentgenové difrakční analýzy (D8 Advance, Bruker, VB).

Tento výzkum je podporován IGA Univerzita Pardubice (SGFChT04).

2Po03
NANOFLUORIDY VZÁCNÝCH ZEMIN - PŘÍPRAVA A VLASTNOSTI

Vilém Bartůněk, Jakub Rak, Jiřina Junková, Martina Mezlíková, Zdeněk Sofer

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 166 28 vilem.bartunek@vscht.cz

Vzácné zeminy mají velice široké uplatnění zejména kvůli jejich luminiscenčním vlastnostem. Nanočástice fluoridů lanthanoidů jsou proto v současné době v centru pozornosti mnoha vědeckých skupin a průmyslových odvětví od medicíny až po pokročilé metody detekce. V našem příspěvku uvedeme možnosti přípravy fluoridů lanthanoidů ve formě nanokrystalů, zejména použitím iontových kaplain a polyolů. Uvedeme přednosti těchto jednoduchých postupů a zároveň uvedeme příklady zajímavých optických vlastností připravených nanomateriálů.

2Po04
SYNTÉZA WOLFRAMANOVÝCH PREKURZORŮ SRÁŽENÍM A REAKCÍ V PEVNÉ FÁZI

Petr Bělina, Veronika Machalíková, Petra Šulcová

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 95, 532 10 Pardubice, petr.belina@upce.cz

Wolframanové materiály typu $MNd_2W_2O_{10}$ (M = Cu, Co, Ni, Mn) jsou studovány pro řadu zajímavých vlastností. Testují se proto jako katalyzátory, materiály pro ukládání informací, plynové senzory apod. Naše pozornost je prozatím zaměřena na využití těchto materiálů jako nových anorganických pigmentů. Příprava těchto materiálů probíhá většinou reakcí v pevné fázi z meziproduktů MWO_4 (M = Cu, Co, Ni, Mn) a Nd_2WO_6. Na přípravu a hodnocení vlastností těchto meziproduktů je zaměřen tento příspěvek.

Jednoduché wolframanany přechodných kovů i kovů vzácných zemin lze připravit reakcí v pevné fázi, kdy výchozími látkami jsou WO_3 a sírany, případně dusičnany příslušných kovů. Snadná a reprodukovatelná je v tomto případě také syntéza těchto látek srážením, kdy wolframany jsou vysráženy z roztoku síranu, případně dusičnanu, přidáním roztoku wolframanu sodného. Připravené materiály byly hodnoceny z hlediska jejich termického chování (TG/DTA, žárová mikroskopie), fázového složení (rentgen-difrakční analýza) a dále z hlediska distribuce velikosti částic a barevnosti. Dále byly oba typy testovány pro přípravu již zmíněných sloučenin typu $MNd_2W_2O_{10}$ (M = Cu, Co, Ni, Mn). Způsob přípravy meziproduktů ovlivňuje nejen barevné a fyzikálně-chemické vlastnosti následně syntetizovaných diwolframanů, ale také např. teplotu potřebnou pro vznik těchto látek.

Příspěvek byl realizován za finanční podpory Interní grantové agentury IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

2Po05
STRUKTURNÍ STUDIE HOŘEČNATÝCH KOMPLEXŮ AMIDINATŮ V ROZTOKU (^{1}H A ^{13}C NMR) A PEVNÉ FÁZI (^{13}C CP/MAS NMR A XRD)

Michal Bílek[1], Tomáš Chlupatý[1], Jiří Brus[2], Zdeňka Padělková[1], Aleš Růžička[1]

[1] Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká republika
[2] Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i., Heyrovského nám.2, 162 06 Praha 6 – Břevnov, Česká republika, e-mail: bilek.michal@centrum.cz

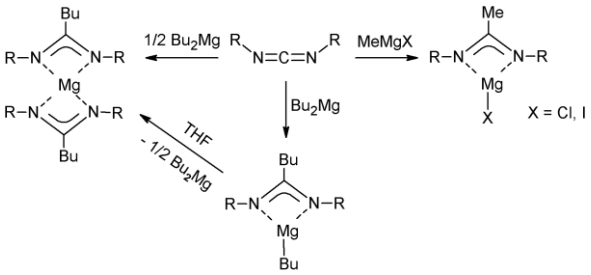
Moderní koordinačních chemie se v poslední době začíná vydávat cestou stabilizace spíše neobvyklých, obecně nižších, oxidačních stavů kovů. A oblast specifické chemie π-elektronově bohatých nenasycených NCN systémů jako jsou amidinaty či guanidinaty není výjimkou.

Nejjednodušší způsob přípravy komplexních sloučenin s využitím zmíněných ligandů je tzv. přímá cesta (bez transmetalačního kroku). Jedná se o adici alkylu/arylu (pro amidinaty)[1] či amidu (pro guanidinaty)[2] příslušného kovu na kumulovaný systém polarizovaných dvojných vazeb základního N=C=N skeletu N,N´-disubstituovaných karbodiimidů.

V rámci tohoto příspěvku bude diskutována příprava hořečnatých komplexů (Obr. 1) stabilizovaných amidinatovými ligandy (čili adice organohořečnatých sloučenin na karbodiimidy), ale převážně strukturní studie připravených sloučenin pomocí ^{1}H a ^{13}C NMR v roztoku a ^{13}C CP/MAS NMR spektroskopie v pevné fázi. Molekulová struktura několik hořečnatých komplexů byla též potvrzena XRD analýzou monokrystalického materiálu.

Připravené sloučeniny budou v další fázi testovány jako redukční činidla[3] (hořečnaté halogenidy), přímá alkylační činidla, reaktanty

v Kumada couplingu či při polymeračních reakcích.



Obr. 1: Reaktivita organohořečnatých sloučenin s karbodiimidy

Autoři děkují Technologické agentuře České republiky (grant č. TA020466) za finanční pomoc.

[1] Chlupatý, T.; Padělková, Z.; Lyčka, A.; Růžička, A. *J. Organomet. Chem.* **2011**, 696, 2346-2354.
[2] Chlupatý, T.; Padělková, Z.; DeProft, F.; Willem, R.; Růžička, A. *Organometallics* **2012**, *31*, 2203-2211.
[3] Green, S. P.; Jones, C.; Stasch, A. *Science* **2007**, *318*, 1754-1757.

2Po06
^{19}F-MRI RELAXAČNÍ ČINIDLA NA BÁZI KOMPLEXŮ DVOJMOCNÉHO NIKLU

Jan Blahut[1], Jan Kotek, Petr Hermann

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy v Praze; Hlavova 8, Praha 2, 128 43; blahutj@natur.cuni.cz*

Zcela nový přístup k MRI zobrazování založený na sledování jader ^{19}F je limitován rychlostí podélné relaxace, která je u běžných fluorderivátů organických molekul nízká a neumožňuje získání dostatečného kontrastu v krátkém čase. Jejího zvýšení lze dosáhnout zavedením paramagnetického centra do blízkosti fluorového atomu. K tomuto účelu lze využít komplexy *f*-prvků, jak popsal například Chalmers [1]. Další, doposud nepopsanou variantou je využití *d*-prvků.

Tento projekt se zabývá studiem relaxačních činidel na bázi komplexů dvojmocného niklu, u nichž se podařilo dosáhnout podobné relaxační rychlosti, jaká je obvyklá u komplexů *f*-prvků. Jako klíčový ligand byl použit 1,8-bis(fosfonomethyl)cyklam, na jehož volné atomy dusíku jsou připojeny trifluorethylové skupiny zajišťující blízkost fluorových atomů a centrálního iontu.

[1] Chalmers K. H., De Luca E., Hogg N. H. M., Kenwright A. M., Kuprov I., Parker D., Botta M., Wilson J. I. Blamire; *Chemistry – A European Journal* **2010**, *16*, 134–148.

2Po07
CLAY MINERAL/PORPHYRIN HYBRID SYSTEMS: FROM CHARACTERIZATION TO APPLICATION

Alexander Čeklovský[1], Shinsuke Takagi[2]

1Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovakia
2Department of Applied Chemistry, Graduate Course of Urban Environmental Sciences, Tokyo, Metropolitan University, Minami-ohsawa 1-1, Hachiohji, Tokyo 192-0397, Japan

Clay minerals have attracted much attention of material scientists for their unique and interesting properties, including swelling, formation of stable colloids, large surface area and especially their capacity to adsorb not only inorganic but also organic compounds. Such properties provide a potential for the development of novel functional organic/inorganic hybrid materials with clay mineral as an inorganic component. The formation of the hybrid materials composed of clay minerals and organic compounds can be easily controlled via ion-exchange, intercalation or adsorption. The study of the photoprocesses of organic photoactive compounds can lead to a wide variety of useful applications in photochemically controlled reactions, construction of molecular devices for optics, solid-state lasers, photodynamic therapy of cancer, etc. [1-2]. Moreover, understanding of above-mentioned processes can be useful in the preparation of photoactive materials with modifiable and desirable properties, such as e.g. hybrid organo/inorganic systems for oxygen sensing applications. Concretely, the combination of metalloporphyrin and layered materials enabled unique oxygen sensing properties due to a heavy-atom effect, following by an oxygen-dependent phosphorescence response. It turned out that the emission from the membrane was sensitive at the range around aerobic conditions. The spectroscopic analysis clay/porphyrin hybrid systems showed these materials can serve as a prospective candidates for a construction of effective, reliable and economical oxygen sensors [2].

Acknowledgement: This work was supported by the Slovak Grant Agency for Science VEGA (No. 2/0107/13).

[1] S. Takagi, M. Eguchi, D. A. Tryk, H. Inoue, J. Photochem. Photobiol. C: Photochemistry

Reviews (7) 2006.
[2] A. Čeklovský, S. Takagi, J. Bujdák, J. Colloid Int. Sci. 360 (1) 2011.
[3] A. Čeklovský, S. Takagi, Cent. Eur. J. Chem 11 (7) 2013.

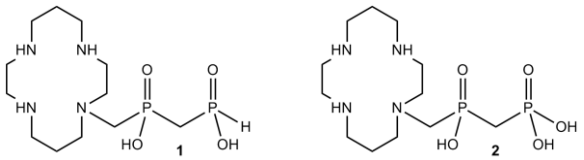
2Po08
MĚĎNATÉ KOMPLEXY PRO RADIOMEDICÍNU – RYCHLE KOMPLEXUJÍCÍ DERIVÁTY CYKLAMU

Tomáš David, Vojtěch Kubíček, Petr Hermann, Ivan Lukeš

Katedra anorganické chemie, Univerzita Karlova v Praze, Přírodovědecká fakulta, Hlavova 8, 128 40, Praha 2, Česká republika, tdavid275@gmail.com

V oblasti nukleární medicíny je věnována velká pozornost mědi neboť její izotopy jsou perspektivní v oblasti terapie i diagnostiky. Před aplikací do těla pacienta však musí být kov vázán ve formě stabilního komplexu, aby nedocházelo k nespecifickému ukládání v tkáních. Pro komplexaci měďnatých iontů jsou intenzivně studovány makrocyklické ligandy typu cyklamu. Kritickým faktorem pro aplikaci těchto ligandů je rychlost vzniku komplexu.

V rámci tohto posteru je prezentována syntéza a koordinační studie dvou cyklamových derivátů, nesoucích bis(fosfinátové) nebo fosfináto-fosfonátové pendantní rameno (**Obr. 1**). Tento typ pendantních ramen byl navržen právě pro urychlení komplexace Cu^{2+} iontů. Oba ligandy tvoří termodynamicky vysoce stabilní komplexy s Cu^{2+} ionty, které vznikají rychle již za laboratorní teploty a při velmi nízkém pH. Tyto komplexy jsou navíc stabilní i z kinetického hlediska – k významnému rozkladu dochází až působením minerálních kyselin za zvýšených teplot. Výsledky prokázaly výrazné urychlení komplexace ve srovnání s podobnými ligandy. Uvedené vlastnosti předurčují studované komplexy k aplikaci v nukleární medicíně, zejména pozitronové emisní tomografii a radioterapii.



Obr. 1 Struktura cyclamových derivátů nesoucí bis(fosfinátové) (**1**) nebo fosfináto-fosfonátové (**2**) pendantní rameno.

Za finanční podporu děkujeme grantovým projektům, GAUK (No. 310011), GAČR (P207/10/P153) a výzkumnému záměru MŠMT ČR (No. MSM0021620857).

2Po09
SONOCHEMICKÉ SRÁŽENÍ OXIDŮ A FOSFOREČNANŮ LANTHANOIDŮ A URANU

Iaroslav Doroshenko[1], Jana Žůrková[1], Jiří Pinkas[1,*]

[1]Ústav Chemie a CEITEC MU, Masarykova univerzita, Brno, Česká republika. Tel: 420549496493; Fax:420549492443; E-mail: jpinkas@chemi.muni.cz

V této práci bylo prostudováno sonochemického srážení oxidů a fosforečnanů vybraných lanthanoidů a uranylového iontu z jejich roztoků v organických rozpouštědlech.

Sonochemická syntéza nerozpustných oxidických a fosforečnanových sraženin vybraných kovů byla studována s ohledem na to, že mohou být po tepelném zpracování potenciálně použity jako stabilní matrice k uložení radioaktivních odpadů, ve formě nerozpustných fází podobných přírodním minerálům.

Všechny sonochemické reakce srážení oxidů byly prováděny v tetraethylenglykoldimethyletheru (tetraglym, TGL), jako prekurzory byly použity acetylacetonátové komplexy vybraných kovů (Y^{3+}, La^{3+}, Ce^{3+}, Pr^{3+}, Nd^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, Dy^{3+}, Er^{3+}, UO_2^{2+}). Ve všech případech docházelo ke srážení nerozpustných produktů. Účinnost vysrážení kovů z matečných roztoků dosahovala ve většině případů více než 60 %. Po kalcinaci při teplotě 1000 ^oC byly získány oxidy obecného vzorce Ln_2O_3 s výjimkou Pr_6O_{11}, NdO_2 a U_3O_8.

Sonochemické srážení fosforečnanů bylo prostudováno pro uranylový iont, jako rozpouštědlo a zdroj fosforečnanových iontů byly použity trimethyl- a triethyl ester kyseliny fosforečné. Jako prekurzory sloužily bis(acetylacetonátový) komplex, dusičnan a octan uranylu. Ke srážení nerozpustných produktů docházelo ve všech případech s účinnostmi vysrážení uranu z mateřského roztoku kolem 30 %. Po vypálení na 1000 ^oC byl izolován difosforečnan uraničitý UP_2O_7 ve všech případech. Charakterizace získaných produktů byla provedena pomocí dostupných analytických metod (IČ-spektroskopie, TG/DSC, PXRD, ICP-OES, BET).

Autoři děkují GAČR P207/11/0555 a CEITEC CZ.1.05/1.1.00/02.0068 za finanční podporu.

[1] Pinkas J., Reichlova V., Zboril R., Moravec Z., Bezdicka P., Matejkova J., 2008, Sonochemical synthesis of amorphous nanoscopic iron(III) oxide from $Fe(acac)_3$, Ultrasonic Sonochemistry 15, 256-264.
[2] Pinkas J., Reichlova V., Serafimidisova A., Moravec Z., Zboril R., Jancik D., Bezdicka P., (2010), Sonochemical Synthesis of Amorphous Yttrium Iron Oxides Embedded in Acetate Matrix and their Controlled Thermal Crystallization toward Garnet ($Y_3Fe_5O_{12}$) and Perovskite ($YFeO_3$) Nanostructures, J. Phys. Chem. C 114, 13557-13564.

2Po10
HYDRATOVANÉ CEMENTY A CA-SI-AL HYDRÁTY; OD TERMOANALYTICKÝCH EFEKTOV K ENTALPII

Milan Drábik[1,2], Ľubica Gáliková[1], Eva Špyrková[1], Eva Scholtzová[1]

[1]Ústav anorganickej chémie SAV, 84236 Bratislava, [2]Katedra anorganickej chémie PRIF UK, 84215 Bratislava

Špecifické vzorky hydratovaných cementov ako aj vybrané minerály Ca-Si-Al hydrátov boli študované termoanalytickými metodikami DSC a TG. Vzorky hydratovaných cementov predstavujú pozoruhodnú sériu technologicky generovaných materiálov podobných minerálom. Základným cieľom bolo porovnať termoanalytické charakteristiky vr. entalpií v uvedených sériách prírodných a technických minerálov. Termoanalytické krivky boli získané na prístroji STA 449 F3 Jupiter®, Netzsch, pri nasledovných meracích podmienkach: vzdušná atmosféra, teplotný nárast 10 $^{o}C.min^{-1}$, teplotný interval do 1000 ^{o}C. Získané údaje boli vyhodnocované štandardným softvérovým vybavením prístroja.

Termoanalytické krivky prírodných minerálov potvrdili zloženie, prítomnosť a obsah vody v štruktúrach, ako aj jednotlivé stupne termických rozkladov zvolených prírodných minerálov. V celom rozsahu študovaných hydratovaných cementov je v teplotnom intervale 80 – 350 ^{o}C pozorovaný komplexný stupeň termického rozkladu – prekrývajúce sa dehydratačné procesy fáz zjednodušene označovaných v chémii cementu ako C-S-H, C-S-A-H a C-A-H. Hodnoty ΔH boli stanovené v intervale 170 – 370 $J.g^{-1}$. Porovnanie entalpií (podľa kriviek DSC, ako aj vypočítaných) poskytlo možnosť posúdiť charakteristiky a procesy v týchto všestranne zaujímavých príkladoch technických minerálov. Pozorované výrazné vplyvy typu cementu, ako aj podmienok a trvania jeho reakcií s vodou potvrdzujú, že hodnoty ΔH môžu byť využité na indikovanie fázových zmien spôsobených ako rozdielmi v zložení cementov tak aj podmienkami hydraulických reakcií (trvanie, štandardná vlhkosť resp. mokré uloženie).

Poďakovanie: Tento výskum je podporovaný agentúrou VEGA, projekt č. 2/0083/12.

2Po11
NAJNOVŠÍ VÝVOJ V OBLASTI MAKRO-DEFEKT-FREE (MDF) MATERIÁLOV (PREHĽAD)

Milan Drábik[1,2], Ľubica Gáliková[1], Barbara Kosednar-Legenstein[3], Gunther Maier[3]

[1]Ústav anorganickej chémie SAV, 84236 Bratislava, [2]Katedra anorganickej chémie PRIF UK, 84215 Bratislava, [3]Materials Center Leoben Forschung GmbH, A-8700, Leoben, Rakúsko

Chemické a materiálovedné prístupy ukázali, že vlastnosti MDF materiálov patriacich do skupiny chemicky viazanej keramiky, sú popri hydratačných reakciách významne ovplyvňované aj modifikáciami rozhraní zŕn cementu a polymérnych častíc na nanoúrovni. Tieto modifikácie sú dôsledkom interakcií, ku ktorým dochádza vplyvom tlaku, pričom vznikajú Al/Fe-O-P siete [1]. Interakcie a vznik sietí sú pozorované ako v štádiu mechanochemického predmiešania, tak aj počas následného synergického efektu vody a tlaku. Podobné stratégie tvorby materiálov pri štandardných podmienkach, avšak s vysokou pridanou hodnotou, sú výzvou pre komunity materiálových chemikov a materiálovedcov [2]. Jeden z cielených príkladov predstavuje aj projekt orientovaný na nové a inovatívne materiály pre strojné zariadenia pump, kde je testovaný aj potenciál MDF materiálov pre takéto účely.

Inšpirujúci pohľad na pokrok ľudstva (v najširšom význame) bol prezentovaný tzv. "prílivovým" modelov a FLOP krivkou *[S. Pearton; Materials Today, 10, 10, 6, 2007]*, ktoré ukazujú pozície a predpovede vybraných oblastí výskumu a technológií materiálov. Podľa autora; predpovede zohľadňujúce aktuálnu pozíciu a budúci vývoj daného materialu alebo technológie vo FLOP diagrame môžu byť hodnotnou pomocou pre ambiciozne kolektívy. Vychádzajúc zo súčasného stavu poznatkov o PoIC (polymérmi impregnovaný betón), PoC (polymérny betón), PoMC (polymermi

modifikovaný betón) a MDF materiáloch a o technológiách výroby navrhujeme ich pozície vo FLOP diagrame, porovnaj aj v [3].

Poďakovanie:Tento výskum je podporovaný agentúrou VEGA, projekt č. 2/0020/11 (Slovensko) a konzorciom COMET K2, projekt A2.15 (Rakúsko).

[1] Milan Drábik; Pure & Appl. Chem., 81, 1413–1421 (2009)

[2] Donald E. Macphee; Proc. of ECI conference series „Advances in Cement & Concrete“ (Davos, 2006)

[3] Milan Drábik, Ľubica Gáliková, Svetozár Balkovic, Robert C. T. Slade; ACI Symposium Publ. 254; American Concrete Institute (2008) on-line na: http://www.concrete.org/PUBS/newpubs/SP254.htm.

2Po12
NOVÉ ŠKORPIONÁTOVÉ LIGANDY OBSAHUJÍCÍ NENASYCENÉ FOSFOROVÉ ATOMY

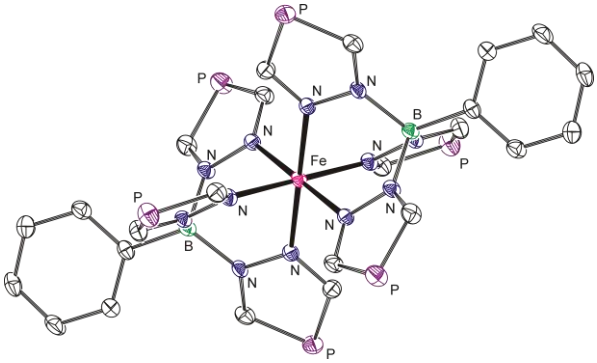
Milan Erben, Libor Dostál, Zdeňka Padělková

Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, nám. Čs. legií 565, 532 10 Pardubice, milan.erben@upce.cz

Pyrazolylborátové ligandy, známé též jako škorpionáty byly poprvé popsány S. Trofimenkem v roce 1966. Tyto polydentátní chelatující ligandy v sobě spojují vlastnosti ligandů cyklopentadienylových a β–diketonátů. Pyrazolylboráty jsou velmi univerzální ligandy a jejich vlastnosti mohou být dle potřeby modifikovány substitucí pyrazolylových kruhů nebo záměnou substituentu na atomu boru a díky tomu nalezly uplatnění v mnoha oblastech chemie jako je například homogenní katalýza, organická syntéza, materiálové inženýrství nebo modelování aktivních míst metalloenzymů. [1, 2]

Chemie nenasycených organofosforitých sloučenin jako jsou fosfaalkeny, fosfaalkyny, fosfoly či fosfininy prošla v posledních letech obrovským rozvojem a značný zájem byl věnován zejména unikátním koordinačním vlastnostem těchto látek. V molekulách s vazbou P=C nebo P≡C jsou na atomech fosforu lokalizovány velmi nízko ležící protivazebné π-orbitaly, jež vystupují jako účinné akceptory elektronů.[3] Přechodné kovy mohou být snadno koordinovány těmito ligandy za vzniku pevné vazby kov-fosfor, která je podobná interakci kov-oxid uhelnatý.

Ačkoliv je známo velké množství poly(pyrazolyl)borátových ligandů obsahujících další donorové atomy (O, S, N, P), nebyly doposud popsány sloučeniny v nichž by byl pyrazol nahrazen fosforovým heterocyklem. V této práci jsme se zabývali přípravou tripodálních chelatujících ligandů s nenasycenými fosforovými atomy. Námi připravené ligandy se chovají podobně jako známé tris(pyrazolyl)boráty, avšak přítomnost dalších koordinačních míst, atomů fosforu, umožňuje současnou koordinaci dalších kovů za vzniku multimetalických komplexů. Příprava nových ligandů, jejich koordinační vlastnosti a struktura studovaných sloučenin bude prezentována v posterovém příspěvku.



Obr. 1 Molekulová struktura komplexu bis[tris(diazafosfolyl)fenylborato]železnatého.

[1] Trofimenko, S.: *Scorpionates: The Coordination Chemistry of Polypyrazolyborate Ligands* (1999) Imperial College Press.

[2] Pettinari, C., Trofimenko S.: *Scorpionates Two* (2008) Imperial College Press.

[3] Floch, P.L.: *Coord. Chem. Rev.* **250** (2006) 627-681.

2Po13
PRÍPRAVA ANORGANICKÝCH NOSIČOV ZO SERPENTINITU

Alena Fedoročková [1], Agnesa Doráková[1]

[1]*Technická univerzita v Košiciach, Letná 9/A, 042 00 Košice, alena.fedorockova@tuke.sk*

Katastrálne územie mesta Dobšiná je poznačené bývalou ťažbou azbestonosného *serpentinitu* ($Mg_3Si_2O_5(OH)_4$). Úroveň technológie úpravy a selektívna ťažba spôsobili vo východnej časti dobývacieho priestoru tvorbu veľkého množstva hlušiny (1,5 mil. m^3) s množstvom zdraviu škodlivých látok, ktorá je skladovaná na haldách. Vzhľadom na prítomnosť zvyškov chryzotilu sa zníženie nepriaznivého dopadu tejto odpadovej

haldy študuje vo vzťahu k možnosti využitia serpentinitu ako suroviny pre získavanie čistých zlúčenín chemickými metódami.

Kľúčovým krokom pri chemickom spracovaní serpentinitovej suroviny na *využiteľné produkty* je lúhovanie. Lúhovaním serpentinitu v kyselinách prechádzajú „rozpustné“ oxidy (reprezentované najmä MgO) do roztoku podľa zjednodušenej rovnice (1), zatiaľ čo SiO_2 ostáva v tuhej fáze ako nerozpustný zvyšok.

$$\frac{1}{3}Mg_3Si_2O_5(OH)_4\,(s) + 2H^+(aq) \rightarrow Mg^{2+}(aq) + \frac{2}{3}SiO_2\,(s) + \frac{5}{3}H_2O\,(l)\,, \qquad (1)$$

Štúdiom vplyvu reakčných podmienok (typ zrážacieho činidla, pH) na vlastnosti SiO_2 a $Mg(OH)_2$ práškov, syntetizovaných z nerozpustného zvyšku a chloridového výluhu, bolo zistené že:a) prídavkom roztoku Na_2SiO_3, pripraveného alkalickým lúhovaním *nerozpustného zvyšku*, do intenzívne miešaného roztoku HCl je možné pri pH = 1 získať mikropórovitý SiO_2 s vysokou čistotou (99,4 %) a veľkým povrchom (553 $m^2.g^{-1}$);

b) podstechiometrickou precipitáciou Mg^{2+} iónov *z výluhu* účinkom suspenzie CaO pri pH = 9,5 je možné pripraviť $Mg(OH)_2$ s merným povrchom 71 $m^2.g^{-1}$ a 94%-nou čistotou.

Uvedené vlastnosti sú predpokladom využitia práškov ako nosičov katalyzátora.

[1] Bergna H.E., Roberts W.O. (Eds.), Colloidal Silica. Fundamentals and applications, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL 2006..

[2] Dalmia Institute of Scientific and Industrial Research; Orissa Cement Limited, Orissa, India: Process for the production of magnesium oxide from brine or bittern. Inventors: Panda J.D., Mahapatra S.K; Int. Cl C04B 9/14 United states patent, 4370422. 01.25.83.

Poďakovanie: *Táto práca vznikla s podporou operačného programu Výskum a vývoj financovaného z Európskeho fondu regionálneho rozvoja (projekt ITMS 26220220144 "Hydrogenácie v kvapalnej fáze“).*

2Po14
DTA-TG INVESTIGATION OF K_2ZRF_6

Zuzana Vasková[1], Eva Špyrková[1], Blanka Kubíková[1], Veronika Gurišová[1], Miroslav Boča[1]

[1] *Institute of Inorganic Chemistry, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 84536 Bratislava, Slovak Republic, E-mail: uachevas@savba.sk*

Phase changes of K_2ZrF_6 have been studied using differential scanning calorimetry. Four endothermal effects (231, 281, 315, 441°C) have been observed in the area of solid phase (up to ≈500°C) and have been in detail investigated. Powder diffraction analysis of the samples after the DTA-TG experiments has been performed and the analysis showed K_2ZrF_6 next to K_3ZrF_7. The influence of oxygen and humidity on the studied processes has been excluded but the character of the sample (with or without a mechanical treatment of the sample) has influenced the DTA-TA measurements and the shift of the position of the peak has been observed.

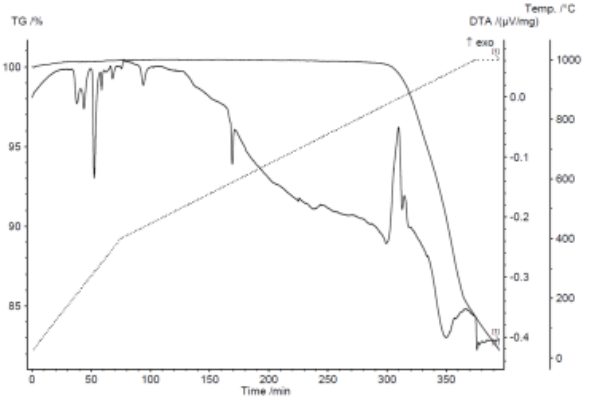


Fig. 1 *DTA-TG report of purchased K_2ZrF_6 with thermal process:*

400°C = 5°C/min → 1000°C = 2°C/min → i = 20min

[1] Novoselova A.V., Korenev Y.M., Simanov Y.R.: Dokl Akad. Nauk SSSR (1961) 139, 892.

[2] Dracopoulos V., Vagelatos J., Papatheodorou G.N., J

2Po15
PRÍPRAVA, SPEKTRÁLNE A TERMICKÉ VLASTNOSTI 4-AMINOBENZOÁT–ZINOČNATÝCH KOMPLEXOV

Katarína Homzová[1], Katarína Györyová[1]

[1]Ústav chemických vied, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, 041 54 Košice, katarina.homzova@student.upjs.sk

Zinok je biogénny prvok a je nevyhnutný pre zdravý rast a imunitný systém. Je základnou štruktúrnou zložkou mnohých proteínov, hormónov, neuropeptidov, hormonálnych receptorov a polynukleotidov. Kyselina 4-aminobenzoová je esenciálnou živinou pre niektoré baktérie a je známa aj pod názvom vitamín B_x. V minulosti bola používaná ako UV-filter v ochranných prostriedkoch pred slnkom [1].

Vzhľadom na biologickú dôležitosť zinku a na nadviazanie doterajšie výskumu na Ústave chemických vied Prírodovedeckej fakulty v Košiciach sa v súčasnosti venuje pozornosť cielenej syntéze nových koordinačných zlúčenín zinku na báze aromatických karboxylátov s molekulovými ligandami (močovina, tiomočovina, teofylín, nikotínamid, izonikotínamid a pod.) [2, 3].

Reakciou zinočnatých karboxylátov s organickým ligandom vo vodno-metanolovom roztoku boli pripravené zlúčeniny všeobecného vzorca $(4\text{-}NH_2benz)_2Zn.L_n$ (kde $4\text{-}NH_2benz$ = 4-aminobenzoát a L = izonikotínamid, nikotínamid, močovina, tiomočovina). Týmto spôsobom boli zosyntetizované nasledujúce zlúčeniny:

$(4\text{-}NH_2benz)_2Zn.2inad$,

$(4\text{-}NH_2benz)_2Zn.2nad$,

$(4\text{-}NH_2benz)_2Zn.2u$,

$(4\text{-}NH_2benz)_2Zn.2tu$.

Pripravené zlúčeniny sme identifikovali prvkovou analýzou a študovali sme ich spektroskopické a termické vlastnosti. Na základe výsledkov IČ spektier sme určili hodnoty separácie $\Delta(COO^-)$, podľa ktorých možno predpokladať spôsob koordinácie karboxylátovej skupiny.

Zistili sme, že pri termickom rozklade týchto zlúčenín sa najprv uvoľní organický ligand a potom dochádza k rozkladu karboxylátového liganda za uvoľnenia CO_2. Konečným produktom tepleného rozkladu je ZnO.

Táto práca vznikla z podpory grantu VVGS-PF-2013-85

[1] Gientka I., Gut K., Duszkiewicz-Reinhard W., Acta Sci. Pol., 8 (2009) 41.

[2] Findoráková L., Győryová K., Hudecová D., Mudroňová D., Kovářová J., Homzová K., Nour-El Dien F. A.: J. Therm. Anal. Calorim., 111 (2013) 1771.

[3] Krajníková A., Győryová K., Kovářová J., Hudecová D., Hubáčková J., Nour-El Dien F. A. Koman M.: J. Therm. Anal. Calorim., 110 (2012) 177.

2Po16
DUSIČNAN DRASELNÝ – HNOJIVO PRE HYDROPONICKÉ APLIKÁCIE

Jana Jurišová, Vladimír Danielik, Pavel Fellner, Jana Gabčová, Milan Králik[1]

Oddelenie anorganickej technológie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, jana.jurisova@stuba.sk
[1]VUCHT, a.s., Nobelova 34, 836 03 Bratislava

Dusičnan draselný je hnojivo vhodné pre skleníkové a hydroponické pestovanie rastlín. Pre takéto aplikácie musí mať oveľa vyššiu čistotu ako hnojivo bežne používané pre pestovanie plodín na otvorených plochách. To sa týka najmä definovaného (stabilného) obsahu KNO_3, nízkeho obsahu nerozpustného zvyšku (pod 0,1 hmotn. %), nízkeho obsahu chloridov (pod 0,5 hmotn. %) a veľmi nízkeho obsahu ťažkých kovov. Príprava KNO_3 takejto kvality sa svojim charakterom blíži k postupom prípravy čistých chemikálií.

V práci prezentujeme spôsob prípravy KNO_3 reakciou KCl a $Mg(NO_3)_2$. Dôvodom výberu $Mg(NO_3)_2$ je to, že podnik Duslo, a.s. Šaľa vyrába tento komponent ako medziprodukt pre hnojivá s obsahom vodorozpustného horčíka a taktiež na výrobu vysokočistého $Mg(OH)_2$.

Ochladením roztoku obsahujúceho ióny K^+, Mg^{2+}, Cl^- a NO_3^- sa získajú kryštály KNO_3. Riadenou kryštalizáciou a definovaným premývaním KNO_3 sa dosiahne obsah Cl^- pod 0,5 hmotn. %. V matečnom lúhu však stále zostáva značné množstvo draslíka. Po zahustení matečného lúhu odparením kryštalizuje karnalit ($MgCl_2.KCl.6H_2O$) a menšie množstvo $MgCl_2.6H_2O$. Rozkladom karnalitu vodou sa získa časť KCl [1], ktorý je možné vracať do výroby KNO_3. Tým sa zvýši výťažok draslíka na viac ako 95 %. Zvyškový matečný lúh sa kvôli lepšiemu skladovaniu v reálnej prevádzke solidifikoval prídavkami MgO. Už od 1 hmot. %

prídavku MgO prestáva byť vzorka tekutá kvôli vzniku zlúčenín obdobných Sorelovmu cementu.

Táto práca bola podporovaná Agentúrou na podporu výskumu a vývoja na základe zmluvy č. APVV-0387-10.

[1] Ullmann´s encyclopedia of Industrial Chemistry, Potassium Compounds, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, p. 22, 2005, doi:10.1002/14356007.a22 039.

2Po17
MODIFIKACE BAKTERIÁLNÍ CELULÓZY V PLAZMATICKÉM VÝBOJI

Kateřina Kolářová, Markéta Píšlová, Vladimíra Vosmanská, Václav Švorčík

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha, kolarova@vscht.cz

Bakteriální celulóza je perspektivní přírodní polymer produkovaný určitými typy bakterií, např. *Gluconacetobacter*, *Agrobacterium*, *Aerobacter*, *Achromobacter*. Tento druh celulózy má jedinečné strukturní a mechanické vlastnosti a ve srovnání s rostlinnou celulózou neobsahuje žádné nežádoucí příměsi. Díky své pevnosti v tahu, nasákavosti a dobré propustnosti se jeví jako ideální materiál pro aplikaci v tkáňovém inženýrství. Modifikace materiálů v plazmatickém výboji je široce používanou a efektivní metodou k zlepšení povrchových vlastností materiálů včetně přírodních polymerů [1].

Tato práce je zaměřena na modifikaci bakteriální celulózy v inertním plazma a sledování změn, které jsou důležité pro následné použití tohoto materiálu pro podporu hojení těžko léčitelných ran. Práce prokázala, že po modifikaci v plazmatickém výboji dochází ke zvýšení nasákavost bakteriální celulózy, mění se povrchová morfolofii a je patrná rychlejší degradace v prostředí fyziologického roztoku, který simuluje prostředí lidského těla.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR díky projektu č. P108/12/1168.

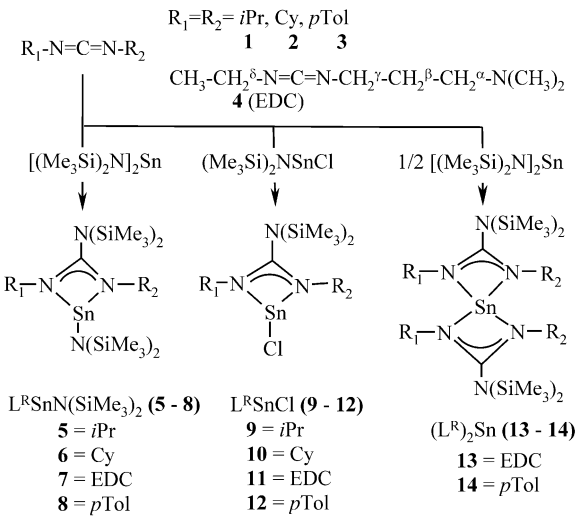
[1] Kolářová K., Vosmanská V., Rimpelová S., Švorčík V., Cellulose 20 (2013) 953-961

2Po18
POLYMERACE ε–KAPROLAKTONU POMOCÍ GUANIDINÁTŮ CÍNATÝCH

Martina Líbalová[1], Tomáš Chlupatý[1], Aleš Růžička[1]

[1]Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko – technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice 532 10, Česká republika

Na základě všeobecného zájmu o sloučeniny nepřechodných kovů v nižších oxidačních stavech byly nedávno pomocí přímé syntézy z amidů cínatých a karbodiimidů syntetizovány cínaté komplexy obsahující různé guanidinátové ligandy (Obr. 1).[1] Jedním z našich zájmů je vyvinout jednoduché a levné katalyzátory "ring opening" polymerizací cyklických esterů vedoucích k biodegradovatelným polymerům. V rámci tohoto plakátového sdělení budou diskutovány výsledky polymerací ε–kaprolaktonu na polykaprolakton iniciované cínatými guanidinátovými komplexy.



Obr. 1 Syntéza katalyticky aktivních sloučenin

[1] T. Chlupatý, Z. Padělková, F. DeProft, R. Willem, A. Růžička *Organometallics*, **2012**, *31*, 2203–2211

2Po19
SYNTÉZA PEROVSKITU TYPU Ba(Sr)SnO_3 DOPOVÁNÉ TERBIEM

Petra Luňáková, Miroslav Trojan, Jakub Trojan

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Technologický pavilon, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, petra.lunakova@student.upce.cz

Perovskit $CaTiO_3$ je tmavě hnědý až černý, průsvitný až průhledný, kovově lesklý,

nedokonale štěpný minerál s nerovným lomem. Byl pojmenován po ruském mineralogovi Lvu Aleksejeviči von Perovskim, avšak poprvé byl popsán v roce 1839 Gustavem Rosem [1]. Je to jedna z nejčastěji se vyskytujících struktur, se kterou se lze setkat u pevných látek anorganického charakteru. Kubická mřížka je ideální strukturou u perovskitových sloučenin, jejichž obecný vzorec je ABX_3, kde kationt A je výrazně vetší a muže mít oxidační číslo +1 až +3, zatímco kationt B je menší a má oxidační číslo +3 až +5. X označuje aniont, což bývá nejčastěji O^{2-} [2].

Obvyklé metody syntézy $BaSnO_3$ jsou reakce v tuhé fázi, srážecí metoda, hydrotermální syntéza a polymerní komplexní metoda. Syntéza v tuhé fázi probíhá reakcí mezi $BaCO_3$ a SnO_2. Tato směs je zahřívána na teplotu 1000 až 1400 °C. Pokud je teplota nižší než 1000 °C vzniká $BaSn_2O_4$. $BaSn_2O_4$ při teplotě 1100 °C reaguje s SnO_2 za vzniku $BaSnO_3$. Případně se může připravit $BaSnO_3$ reakcí $Ba(NO_3)_2$ s SnO_2. Výchozí směs je nejdříve mleta po dobu 4 hodin a následně vypalována při teplotě 800 °C po dobu 8 hodin. Následuje další výpal při teplotě 1000 °C po dobu 24 hodin [3].

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován IGA Univerzity Pardubice SGFChT 04.

[1] J. Twu, P.K. Gallagher: Properties and applications of perovskite- type oxides, (1992)
[2] M.A. Pena, J.L.G. Fierro: Chemical Review, (2001)
[3] A.M. Azad, N.C. Hon: Journal of Alloys and Compounds, (1998)

2Po20
NANOČÁSTICE ZLATA PŘIPRAVENÉ METODOU LPPS

Libor Mastný[1], Monika Vilémová[2], Vlastimil Brožek[2]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 16628 Praha, libor.mastny@vscht.cz*
[2]*Ústav fyziky plazmatu AVČR v.v.i. Praha, Za Slovankou 3, 18200 Praha, brozek@ipp.cas.cz*

Generátor plazmatu WSP® s výkonem 100 kW umožňuje realizovat chemické reakce při teplotách až 25000 K. Metodou LPPS (Liquid Precursors Plasma Spraying) je možno připravit nanočástice prvků nebo sloučenin termickým rozkladem vodných roztoků, vnášených v aerosolové formě do proudu plazmatu. V práci je popsána konstrukce aparatury, ve které byl zpracován roztok kyseliny tetrachloridozlatité v teplotním intervalu 5000-10000 K. V případě vertikální varianty uspořádání aparatury byly nanočástice zlata získány ve formě koloidního roztoku s velikostí sférických nanočástic 50-120 nm, měřeno fotonovou korelační spektrometrií. Jejich velikost lze ovlivnit změnou koncentrace roztoku, úpravou jeho povrchového napětí, průměrem rozprašovací trysky nebo změnou tlaku nosného plynu. Zeta-potenciál je ovlivněn zvýšením kyselosti vodného koloidního roztoku, způsobené částečnou absorpcí oxidů dusíku produkovaných v okrajových částech plazmatu a časově proměnným obsahem dusitanových a dusičnanových iontů. Při horizontálním uspořádání bylo možno připravit nanostrukturní povlaky Cassiova purpuru na libovolných skleněných, keramických nebo kovových substrátech, což umožnilo popsat a studovat další fyzikální parametry koloidního zlata.

[1] Bertolissi G. et al., Journal of Thermal Spray Technology Vol.21(6) 2012, p.1148-1162
[2] Brožek V., Bertolissi G., NANOCON 2012 Conference Proceedings, s.33-38, ISBN 978-80-87294-32-1

2Po21
METODIKA TESTOVÁNÍ MĚDĚNÉHO POVLAKU OCELOVÉHO JÁDRA VODIČE

Libor Mastný[1], Renáta Slavětínská[1]

[1]*VŠCHT Praha, Ústav anorganické chemie, Technická 5,166 28 Praha 6, Česká republika libor.mastny@vscht.cz*

Dobrou ochranu proti působení chemikálií, popř. ovzduší, poskytují ocelovým vodičům povlaky na bázi např. Sn nebo Cu a jejich slitin. Parametrem hodnocení kvality povlaku ocelového jádra je porozita. Ta není spojena s drsností povrchu, ale se vznikem „jemných“ prohlubní v povlaku, které umožňují přímý vstup agresivního prostředí k jádru vodiče za vzniku korozních produktů. Zkouška porozity Cu povlaků na ocelovém jádře je podle ČSN EN 10244:2009 založena na reakci mědi nechráněného železa s kyselinou chlorovodíkovou a následným stanovením množství rozpuštěných iontů železa atomovou absorpční spektroskopií. Kvalita povlaku je tedy nepřímo úměrná zjištěnému množství rozpuštěných iontů. Metoda je závislá na přístrojovém vybavení, není vizuálně sledovatelná a je ovlivněna velikostí pórů. Z jedné velké prohlubně se může uvolnit víc železnatých iontů než z více míst s malými poruchami.

V práci je popsána metodika stanovení kvality měděného povlaku vodiče modifikovanou ferroxylovou zkouškou, která při kombinaci hexakyanidoželezitanových a hexakyanidoželeznatanových iontů umožňuje zachytit přítomnost dvojmocných i trojmocných iontů korozních produktů železa. Citlivost testu je možné upravit změnou koncentrace roztoku a dobou expozice vzorku. Snímky metalografických výbrusů odhalující nehomogenitu, vysokou prozitu a malou adhezi měděné vrstvy na ocelovém jádře vodiče potvrdily výsledky zjištěné touto jednoduchou a cenově nenáročnou zkouškou.

Modifikovaná ferroxylová zkouška je použita k testování povrchu ocelových vodičů používaných při přípravě roznětných sítí.

2Po22
DETERMINATION OF THE REDOX ACTIVITY OF CHOSEN AMINO ACIDS BY CYCLIC VOLTAMMETRY

Kristína Matelková[1], Roman Boča[1,2], Juraj Hudák[2],Wolfgang Linert[3]

[1]*Institute of Inorganic Chemistry, FCHPT, Slovak University of Technology, SK-812 37 Bratislava, Slovakia, k.matelkova@gmail.com*
[2]*Depart ment of Chemistry, FPV, University of SS. Cyril and Methodius, SK-917 01 Trnava, Slovakia*
[3]*Institute of Applied Synthetic Chemistry, Vienna University of Technology, A-1060 Vienna, Austria*

Deposits of iron oxides found in the human brain were investigated by electron microscopy, Mössbauer spectroscopy and magnetometry. Their size varies from 10 to 1000 nm. They contain magnetite (Fe_3O_4) and/or maghemite (γ-Fe_2O_3), which are magnetic minerals, as well as non-magnetic hematite (α-Fe_2O_3), and other iron-oxide deposits [1]. Formation of such deposits is associated with dysfunction of metabolism of ferritin and dopamine. Monoamines, in general, are potential reducing agents which could interfere with Fe(III) sources contained in ferritin.

Cyclic voltammetry has been used in characterization of redox properties of some monoamines, namely four amino acids: tyrosine, tryptophan, glycine, and cysteine. Measurements were conducted in aqueous solution with NaCl as a supporting electrolyte. Sodium hydroxide was added for a better solubility of the samples. Standard three-electrode setup was used: platinum working electrode, platinum auxiliary electrode, and Ag/AgCl reference electrode. The data show that the oxidation is not followed by a reversible reduction. The anodic peak potential (*vs* Ag/AgCl electrode) varies between 1.09 – 1.38 V: E_{pa} =1.38 V for cysteine, and E_{pa} = 1.15 V for glycine. In the voltammogram of tryptophan a sharp peak at E_{pa} = 1.24 V is well visible, and for tyrosine E_{pa} = 1.09 V. The peak values are little sensitive to pH, expect cysteine. In addition to the oxidation in solutions, the ionization of aminoacids has been studied by using quantum-chemical methods (*ab initio* HF+MP2; DFT) [2]. The main message from these studies is that the aminoacids could act as strong reducing agents which can interfere with iron sources.

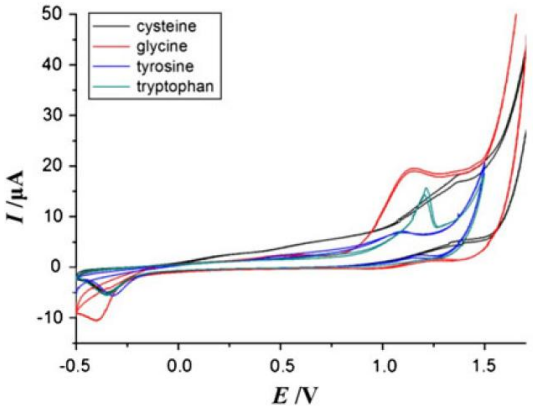


Fig. 1 Cyclic voltammograms of cysteine, glycine, tyrosine and tryptophan *vs.* Ag/AgCl reference electrode at the room temperature, scan rate 60 mV/s, two scans; amino acids at pH ~ 11.5 ($NaCl/H_2O/NaOH$).

This work was supported by Slovak grant agencies (APVV-0014-11, VEGA-1/0073/13) and COST CM-1103.

[1] R. Boča et al: Magnetic and Non-Magnetic Iron Oxide Deposits in Basal Ganglia, Nova, New York (2013)

[2] [2] K. Matelková, K. Ossberger, J. Hudák, J. Vatrál, R. Boča, W. Linert, Monatsh. Chem. 144 (2013) 937-949. Redox activity of some non-innocent amino acids.

2Po23
FOTOKATALYTICKÁ AKTIVITA $BiVO_4$ A JEHO KOMPOZITOV S TIO_2

Robert Michal[1], Mária Čaplovičová[2], Gustav Plesch[1]

[1]*Katedra anorganickej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave,842 15 Bratislava,* michal@fns.uniba.sk
[2]*Katedra ložiskovej geológie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského v Bratislave, 842 15 Bratislava*

V poslednej dobe sa okrem TiO_2, venuje značná pozornosť ďalším fotokatalyzátorom na báze polovodivých oxidov kovov resp. ich kompozitom. Niektoré vanadičnany majú nižšiu energetickú medzeru ako TiO_2 a absorbujú fotóny vo viditeľnej oblasti elektromagnetického spektra. Doterajšie výsledky ukazujú na jeho sľubnú fotokatalytickú aktivitu pri ožarovaní slnečným svetlom.

Cieľom tejto práce bolo preskúmať fotokatalytické vlastnosti a stabilitu vanadičnanu bizmutitého a kompozitných fotokatalyzátorov na báze $TiO_2/BiVO_4$. Skúmali sme vplyv množstva $BiVO_4$ v uvedenom kompozite (0,1 – 5 *hm.%* $BiVO_4$) a vplyv teploty žíhania (400°C – 800°C) na fotokatalytickú aktivitu. Sledované vzorky boli pripravené precipitáciou, resp. koprecipitáciou. Na stanovenie fotokatalytickej aktivity bola použitá metóda stanovenia úbytku celkového obsahu organického uhlíka (TOC). Ako modelová látka bol použitý roztok fenolu. Ako ďalšia modelová látka bola použitá metylénová modrá, ktorej úbytok v čase sa stanovoval UV-VIS spektrometriou. Suspenzie roztokov modelových látok a fotokatalyzátora sa ožarovali metalhalogenidovou výbojkou simulujúcou slnečné žiarenie za stáleho miešania a prístupu vzduchu. Vzorky boli charakterizované metódami práškovej röntgenovej difrakcie (XRD), Ramanovou a elektrónovou spektroskopiou ako aj rastrovacou elektrónovou mikroskopiou (REM).

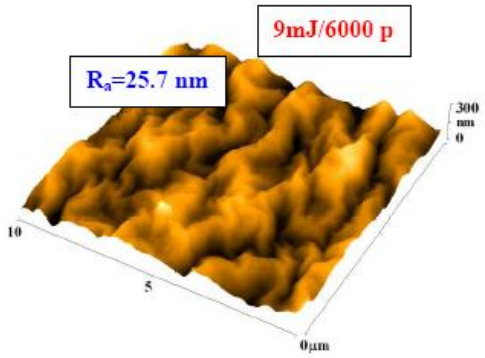
Autori ďakujú za finančnú podporu Vedeckej grantovej agentúre MŠVVaŠ SR (Grant VEGA 1/0605/12) a Univerzite Komenského (Grant mladých UK /191/2013)

2Po24
NANOSTRUKTUROVÁNÍ PLLA LASEROVÝM SVAZKEM A PLAZMATEM

Iva Michaljaničová[1], Petr Slepička[1], Nikola Slepičková Kasálková[1], Petr Sajdl[2], Václav Švorčík[1]

[1] *Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika, iva.michaljanicova@vscht.cz*
[2] *Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika,*

Tkáňové inženýrství je rychle se vyvíjející odvětví, v rámci kterého se vědci snaží upravit vlastnosti vybraných materiálů tak, aby odpovídaly potřebám pro růst buněk. Cílem této práce bylo zkoumat vlastnosti poly(L-laktidu) (PLLA), biokompatibilního a biodegradova–telného polymerního substrátu, po modifikaci KrF laserovým svazkem. Zároveň byla vyvíjena nová metoda nanostrukturování PLLA kombinací efektu plazmatické [1] a laserové [2] expozice. Studována byla zejména smáčivost a morfologické změny v kombinaci se změnami v povrchové chemii. Laserovým ošetřením dochází k velmi významným ablačním ztrátám, přičemž tloušťka odstraněné vrstvy je tím větší, čím vyšší je laserový tok a počet pulsů. Pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM) byl pozorován vliv zmíněných parametrů na tvorbu morfologických struktur a na zdrsnění či vyhlazení povrchu. Na počtu laserových pulsů silně závisí také povrchová chemie. Zjištění optimálních podmínek pro zdrsnění nebo vyhlazení biopolymerního povrchu může nalézt silné uplatnění právě ve tkáňovém inženýrství pro biokompatibilní nosiče různých typů buněčných linií.



Obr. 1 Laserem modifikovaná PLLA

Autoři děkují za finanční podporu grantu GAČR č. 13-06609S. Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2013).

[1] P. Rytlewski, W. Mróz, M. Zenkiewicz, J. Czwartos, B. Budner, Laser induced surface modification of polylactide. J. Mater. Process. Technol. 212 (2012) 1700– 1704.
[2] P. Slepička, I. Michaljaničová, N. Slepičková Kasálková, Z. Kolská, S. Rimpelová, T. Ruml, V. Švorčík, Poly-L-lactic acid modified by etching and grafting with gold nanoparticles. J. Mater. Sci. (2013) DOI 10.1007/s10853-013-7383-9.

2Po25
PŘÍPRAVA A STUDIUM REAKTIVITY LITHNÝCH KOMPLEXŮ ASYMETRICKÝCH AMIDINÁTŮ

Martin Novotný[1], Zdeňka Padělková[1], Aleš Růžička[1]

[1]*Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10, Pardubice, Česká Republika*
martin.novotny1@student.upce.cz

Amidináty kovů, jsou v poslední době často studovaným typem komplexů. Komplexy přechodných kovů těchto ligandů našly uplatnění především jako katalyzátory v polymeračních reakcích.[1] V současnosti se tento typ ligandů využívá ke stabilizaci, především nižších, oxidačních stavů kovů. Velký zájem vzbudilo využití amidinátů pro přípravu a charakterizaci nízkovalentních sloučenin křemíku, germania a cínu.[2], [3]

Pro přípravu asymetrických amidinátů byl zvolen způsob popsaný ve Schématu 1. Jedná se o adici *N,N'*-disubstituovaných amidů na silně polarizovanou trojnou vazbou C-N karbonitrilu, s následnou migrací silylovaných substituentů mezi dusíkovými atomy. [4]

V rámci tohoto plakátového sdělení budou diskutovány nově připravené asymetrické amidináty lithné, jejich struktura a reaktivita s chloridem cínatým.

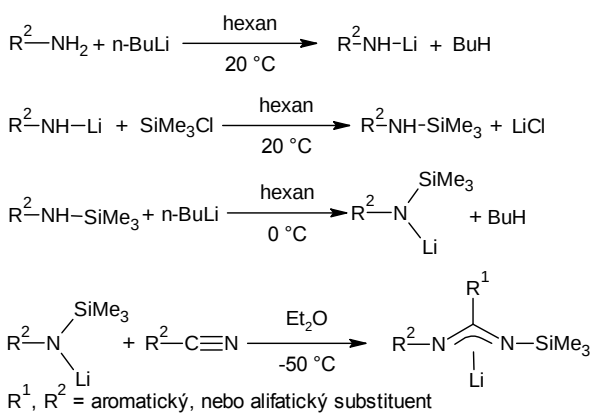


Schéma 1

Autoři by chtěli poděkovat Grantové agentuře České republiky za finanční podporu (P207/12/0223).

[1] V. Volkis, E. Nelkenbaum, A. Lisovskii, G. Hasson, R. Semiat, M. Kapon, M. Botoshansky, Y. Eishen, M.S. Eisen, *J. Am. Chem. Soc.*, **2003**, *125*, 2179.
[2] S. S. Sen, H. W.Roesky, D. Stern, J. Henn, D. Stalke *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *132*, 1123.
[3] S. S. Sen, M. P. Kritzler-Kosch, S. Nagendran, H. W.Roesky, T. Beck, A. Pal, R. Herbst-Irmer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2010**, *33*, 5304.
[4] F. Antolini, P. B. Hitchcock, A. V. Khvostov, M. F. Lappert *Can. J. Chem*, **2006**, *84*, 269.

2Po26
BIFUNKČNÍ CHELATANTY PRO SELEKTIVNÍ KOMPLEXACI MĚDI

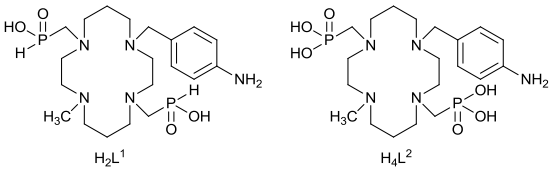
Monika Paúrová[1], Jan Kotek[1], Petr Hermann[1]

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 8, 128 43 Praha 2, Česká republika, monika.paurova@natur.cuni.cz*

V posledních letech jsou ve větší míře studovány bifunkční makrocyklické ligandy vhodné pro komplexaci radioizotopů mědi (např. ^{61}Cu, ^{64}Cu a ^{67}Cu). Vznikající koordinační sloučeniny nacházejí díky svým vhodným fyzikálním a chemickým vlastnostem široké uplatnění na poli nukleární medicíny, a to jak v diagnostice (PET, SPECT), tak i v terapii nádorového onemocnění.

Byly připraveny a studovány dva nové cyklamové bifunkční deriváty nesoucí methylfosfinátové pendantní skupiny $\mathbf{H_2L^1}$ a methylfosfonátové pendatní skupiny $\mathbf{H_4L^2}$. Ligandy byly zkoumány z hlediska termodynamické stability a kinetické inertnosti jejich komplexů. Ze získaných dat protonizačních konstant a konstant stabilit komplexů přechodných kovů (Cu, Zn, Ni) bylo potvrzeno, že připravené ligandy jsou velmi vhodnými kandidáty pro selektivní komplexaci dvojmocné mědi ($\log\beta_{ML}$ = 18,3 a 23,2 pro $\mathbf{H_2L^1}$ a $\mathbf{H_4L^2}$). Z hodnot kysele katalyzované dekomplexace byla zjištěna malá kinetická inertnost u obou vzniklých komplexů (poločas disociace v 1M $HClO_4$ je 47 s a 44 s pro $\mathbf{H_2L^1}$ a $\mathbf{H_4L^2}$, 25 °C).

Studované ligandy mohou být využity při separaci radioizotopů mědi (oddělení mateřských/dceřinných izotopů zinku a niklu), tak i při radiomedicínských aplikacích.



H_2L^1 H_4L^2

Obr. 1 Strukturní vzorce ligandů.

Za finanční podporu děkujeme grantovému projektu GAČR (P207/11/1437).

2Po27
CHARACTERIZATION OF GYPSUM FROM QUARRY KOBEŘICE (CZECH REPUBLIC)

Plevová Eva[1], Konečný Pavel[1], Vaculíková Lenka[1], Kožušníková Alena[1], Peterková Janka[2]

[1]*Institute of Geonics, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Studentská 1768, 708 00 Ostrava, Czech Republic, eva.plevova@ugn.cas.cz*
[2]*GYPSTREND s.r.o. sádrovcové doly, 747 27 Kobeřice, Czech Republic*

Gypsum quarry in Kobeřice in Opava region is the only quarried gypsum deposit in Czech Republic. Evaporite sediments in this quarry belong to the westernmost part of the Carpathian Foredeep basin ranging from Moldova, Ukraine, Poland, to the Czech Republic.

This paper reports an investigation of the composition of evaporites from this locality. The X-ray diffraction along with FTIR spectroscopy and thermal analysis show that almost pure gypsum occurs mainly in autochthonous horizons. While allochthonous clastic deposition is represented by gypsum containing also calcite, quartz, clay minerals and organic matter. The quantity of calcite can exceed 40% in some cases. The presence of these minerals can strongly affect the final properties of quarried raw material.

This study was supported by Grant Programme of Science and Research in the Moravian-Silesian region (1613/2012/RRC - Mechanical optical and chemical properties of gypsum from quarry Kobeřice).

2Po28
STUDIUM KINETIKY KOMPLEXACE ZIRKONIA S DTPA A DFO

Miroslav Pniok[1], Jan Kotek[1], Vojtěch Kubíček[1], Petr Hermann[1]

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, Hlavova 2030, 128 43 Praha 2, Česká republika, pniok@natur.cuni.cz*

Radionuklid ^{89}Zr se během posledních deseti let stal velmi slibným radionuklidem pro pozitronovou emisní tomografii (PET). Díky svým fyzikálním vlastnostem se stal radionuklidem první volby pro přípravu nových radioimunokonjugátů pro zobrazování pomocí „imuno-PET“. Oproti tomu koordinační chemie iontu Zr^{4+} ve vodném roztoku není příliš prostudována. Ačkoli se v pre-klinické praxi používají konjugáty komplexu Zr-DFO (DFO = Deferoxamine B), není známa jeho konstanta stability ani struktura v pevném stavu.

V této práci jsou popsány nové analytické metody, díky kterým lze sledovat rychlost komplexace iontů Zr^{4+} s ligandy DTPA a DFO. Tyto metody jsou založeny na transchelataci Zr^{4+} ze slabých komplexů Zr-fluorid a Zr-oxalát studovanými ligandy. Fluoridová iontově selektivní elektroda byla použita při studiu kinetiky komplexace v systému Zr-fluorid. Pro studium formační kinetiky komplexů Zr-DTPA a Zr-DFO přes ligandovou výměnu z komplexu Zr-oxalát byla použita UV-Vis spektrofotometrie. Anionty oxalátové byly vybrány proto, že jsou využívány jako prekomplexační činidlo při značení ^{89}Zr.

Naše kinetické studie ukazují, že rychlost vzniku komplexu Zr-DFO z obou slabých komplexů je znatelně rychlejší než pro komplex Zr-DTPA. Navíc prezentovaná kinetická data umožňují mechanistický náhled na tvorbu komplexů Zr-DTPA a Zr-DFO. Tyto analytické metody jsou nezbytné pro studium nových potenciálních ligandů pro komplexaci radionuklidu ^{89}Zr.

2Po29
CYCLEN-BASED EUROPIUM(III) COMPLEXES AS LUMINESCENT RECEPTORS

Soňa Procházková[1], Jan Kotek[1], Vojtěch Kubíček[1] and Petr Hermann[1]

[1] Inorganic Chemistry Department, Charles University in Prague, Faculty of Science, Hlavova 8, 128 40, Prague 2, Czech Republic, sona.prochazkova@natur.cuni.cz

Cyclen (1,4,7,10-tetraazacyclododecane) derivatives are well known to form thermodynamically stable and kinetically inert complexes with lanthanides that may present one or two water molecules in the metal coordination sphere. These complexes can be used as contrast agents in the medical imaging techniques.

The Eu(III) ion is the most appropriate luminescent probe in view of its non-degenerate emissive state $^5D_0$. Quenching of the Eu(III) luminescence by high-energy vibration allows assessing the number of water molecules *q* interacting in the inner coordination sphere from lifetime measurements.

This poster is focused on Eu-DOTA (1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1,4,7,10-tetraacetic ***acid***) and Eu-BPAMD ([(4-{[bis-(phosphonomethyl)]carbamoyl} methyl)-7,10 bis(carboxymethyl)-1,4,7,10-tetraazacyclododec-1-yl)acetic ***acid***]) complexes. The emission spectra of these complexes were measured. Furthermore sorts of lifetime experiments were carried out. The number of water molecules *q* was counted from the acquired data and the dependence of *q* on time and also on ratio of metal:ligand was determined.

2Po30
POLYMÉRNE KABOXYLÁTOMEĎNATÉ KOMPLEXY SO 4-PYRIDÍNMETANOLOM – PRÍPRAVA A VLASTNOSTI

Miroslava Puchoňová[1], Zuzana Vaskova[2], Jan Moncol[1], Marián Koman[1], Milan Mazúr[3], Dušan Valigura[1]

[1]Oddelenie anorganickej chémie UACHaM FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, miroslava.puchonova@stuba.sk
[2]Ústav anorganickej chémie SAV, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava
[3]Oddelenie fyzikálnej chemie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava

História meď obsahujúcich liečiv s priaznivými účinkami na rôzne kožné, zápalové, vredové a infekčné ochorenia siaha až do staroveku [1]. Moderná bioanorganická chémia sa v súčasnosti orientuje na prípravu meďnatých komplexov a ich využitie v medicínskej či technologickej sfére. Štúdium meďnatých komplexov s derivátmi kyseliny salicylovej, konkrétne kyselín metylsalicylových, spolu so 4-pyridínmetanolom ako dusíkatým ligandom predstavujú podskupinu zaraďujúcu sa do tejto oblasti výskumu. 4-Pyridínmetanol uprednostňuje, na rozdiel od 3-pyrdínmetanolu, modentátnu koordináciu atómom dusíka vo väčšine prípadov vyskytujúcich sa v Cambridskej kryštalografickej databáze. Iba v jednom komplexe sa viaže ako mostíkujúci ligand [2]. Novou zaujímavou koordinačnou zlúčeninou podobného charakteru je produkt sumárneho vzorca $[Cu(5\text{-}Mesal)_2(4\text{-}pyme)_2]_n$., kde N-donorový ligand vystupuje ako mostíkujúci. Ďalším príkladom mostíkujúcej koordinácie 4-pyridínmetanolu je komplex získaný s kyselinou 3-nitrobenzoovou. Obidve látky boli pripravené z vodno-metanolového prostredia. Kryštály boli podrobené monokryštálovej röntgenoštruktúrnej analýze. Podobné štruktúrne usporiadanie v oboch komplexoch vytvára nekonečné 1D „double bridged“ reťazce. Študovali sa tiež podmienky prípravy ako aj spektrálne vlastnosti komlexov (elektrónové, infračervené a EPR spektrá).

Tato práce vznikla za podpory grantu APVV 0014/11 a Grantu pre podporu mladých vedeckých výskumníkov BAKOP 1334.

[1] Ďuračková Z: Voľné radikály a antioxidanty v medicíne, Bratislava (1998)
[2] Ucar I., Bulut I., Karadag; A.Struct.Chem. 20, 825, (2009)

2Po31
ŠTÚDIUM KOMPLEXOTVORNÝCH VLASTNOSTÍ AMINOMETYL–FOSFÍNOVÝCH KYSELÍN V ROZTOKU

Ingrida Rostášová[1], Zuzana Vargová[1], Katarína Györyová[1], Peter Hermann[2], Ivan Lukeš[2]

[1]Department of Inorganic chemistry, Institute of Chemistry, University of P. J. Šafárik, Moyzesova 11, 041 54 Košice, Slovak Republic, ingrida.rostasova@student.upjs.sk
[2]Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Science, Charles University, Hlavova 2030, 128 40 Praha, Czech Republic

Prítomnosť aminometylfosfónových kyselín, ako fosforových analógov aminokyselín, bola dokázaná v telách rastlín a živočíchov už v 40-tych rokoch minulého storočia. Tieto kyseliny vo svojej štruktúre obsahujú jednu alebo viacero R-$PO(OH)_2$ skupín a uplatňujú sa v oblastiach ako životné prostredie, odpadové hospodárstvo, poľnohospodárstvo a magnetická rezonancia [1]. V posledných rokoch bolo syntetizovaných mnoho komplexných zlúčenín s kovovými iónmi a to kvôli ich biologickej aktivite (napríklad komplexy s Pt(II) ako potencionálne chemoterapeutiká, ióny prechodných kovov Zn(II), Cu(II), Fe(II) sú využívané na liečenie rôznych kostných ochorení). Ďalšími študovanými derivátmi fosforových analógov aminokyselín boli tie, ktoré vo svojej molekule obsahovali fosfínové skupiny. Na rozdiel od aminometylfosfónových kyselín, tieto majú na atóme fosforu z fosfonátovej skupiny namiesto jednej hydroxo skupiny naviazanú inú funkčnú skupinu (ako napríklad metyl, butyl, fenyl a ďalšie). Vzhľadom od naviazania rôznych funkčných skupín závisia aj ich komplexotvorné vlastnosti. Tieto substituenty majú rozličnú veľkosť a rôzny indukčný efekt na základe ktorých možno očakávať ich rôzne komplexotvorné vlastnosti [2].

Cieľom práce bolo študovať správanie sa aminometylfosfínových kyselín vo vodnom roztoku v závislosti na pH. Stanovili sme ich disociačné konštanty potenciometrickými titráciami pri teplote 25 ± 0.1°C a iónovej sile I = 0.1 M(KNO_3). Najprv boli stanovené a porovnané konštanty stability pre tvorbu binárnych systémov Zn(II):aminometylfosfínová kyselina v pomeroch 1:1, 1:2 a 1:4. Ternárne systémy Zn(II)-cyklén s aminometylfosfínovými kyselinami boli merané metódou „out-of-cell“. Tvorba komplexných častíc bola sledovaná aj metódou NMR spektroskopie v závislosti na pH.

[1] Galezowska J., Gumienna-Kontecka E.: *Coord. Chem.Rev.*, (2011) doi:10.1016/j.ccr.2011.07.002
[2] Rohovec J., et al.: *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, (1996) 2685.

2Po32
ŽÍHÁNÍ ZLATÝCH NANOVRSTEV ZA PROMĚNNÉHO TLAKU

Jakub Siegel, Ondřej Kvítek, Alena Řezníčková, Václav Švorčík

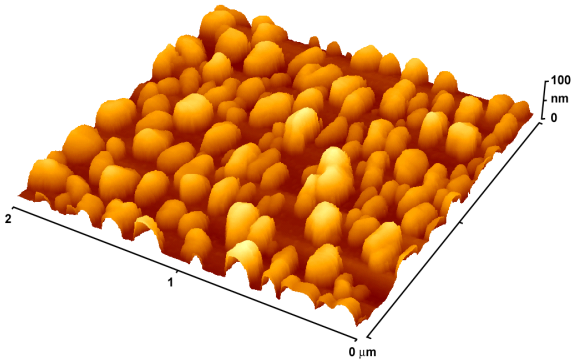
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha, jakub.siegel@vscht.cz

Tepelná stabilita ultratenkých kovových vrstev je zásadní informací pro řadu elektronických aplikací, kde tepelné namáhání vyvolává dramatické změny vlastností jednotlivých součástek. Zvýšená teplota může vést až k destrukci souvislé vrstvy a ke vzniku nesouvislých kovových struktur. Tyto strukturní změny jsou doprovázeny dramatickým poklesem vodivosti kovových vrstev, což představuje problém při aplikaci vrstev v elektornických obvodech, kde je naopak vysoká vodivost žádoucí. Nesouvislé kovové struktury sestávající z isolovaných ostrůvků či klastrů nicméně vykazují vlastnosti zcela ojedinělé a odlišné od jejich objemových protějšků.

Kromě zajímavých katalytických či elektrických vlastností vykazují nanostruktury ušlechtilých kovů také charakteristické tvarově závislé optické vlastnosti, které vyvolávají velký technologický zájem a očekávání. To platí zejména v případě zlatých nanostruktur [1, 2].

V této práci jsou studovány vlastnosti ultratenkých zlatých vrstev a izolovaných nanoostrůvků připravených metodou katodového naprašování na skleněném substrátu a jejich změny vyvolané žíháním. Je sledován vliv tlaku okolní atmosféry v průběhu žíhacího procesu na elektrické a optické vlastnosti struktur. Změny povrchové morfologie, které určují výsledné elektrické a optické vlastnosti struktur, jsou studovány pomocí mikroskopie atomárních sil (AFM).

Práce prokázala, že podmínky žíhání mají zásadní vliv na strukturu Au filmů a jejich optické a elektrické vlastnosti. Lze konstatovat, že žíhání ve vakuu vede ke stabilizaci souvislé zlaté vrstvy.



Obr. 1 AFM snímek na vzduchu žíhané (300°C) Au vrstvy o tloušťce 17 nm.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR v projektech č. P108/11/P337 a P108/10/1106.

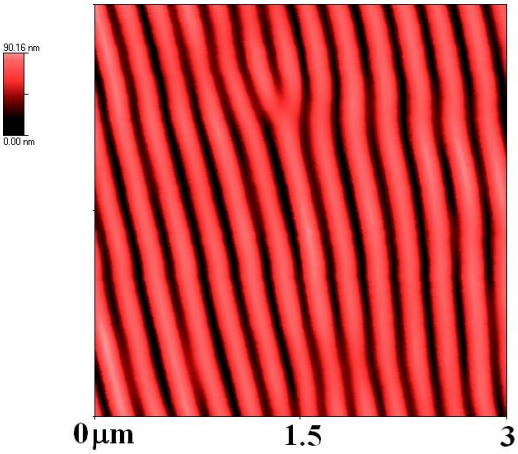
[1] J. Siegel, O. Kvítek, P. Slepička, J. Náhlík, J. Heitz, V. Švorčík, Nucl. Instr. Meth. B 272 (2012) 193.
[2] J. Siegel, O. Kvítek, P. Ulbrich, Z. Kolská, P. Slepička,V. Švorčík, Mat. Lett. 89 (2012) 47.

2Po33
PEN - EXCELENTNÍ KANDIDÁT PRO TVORBU PERIODICKÝCH NANOSTRUKTUR

Petr Slepička[1], Oldřich Neděla[1], Nikola Slepičková Kasálková[1], Petr Sajdl[2], Martin Veselý[3], Václav Švorčík[1]

[1] Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika, petr.slepicka@vscht.cz
[2] Ústav energetiky, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika
[3] Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28, Praha, Česká Republika

Cílem práce bylo studium vlivu laserového toku, počtu pulsů a úhlu dopadu laserového svazku na vlastnosti povrchu polyethylen naftalátu a vznik periodických struktur. U vybraných vzorků byly sledovány změny povrchových vlastností po dopadu excimerového svazku a doby stárnutí na kontaktní úhel modifikovaných polymerů. Zkoumány byly změny koncentrace kyslíku na laserem modifikovaném povrchu. Morfologie povrchu byla sledována mikroskopií atomárních sil (AFM) a skenovací elektronovou mikroskopií s fokusovaným iontovým svazkem (TESCAN LYRA3GMU FIB-SEM). Bylo zjištěno, že na polyethylen naftalátu dochází ke vzniku periodických nanostruktur v rozmezíca 6-12 mJcm^{-2}, podobně jako na PET [1,2]. Při zvýšení počtu pulsů dochází ke vzniku pravidelné povrchové struktury za nižších hodnot laserového toku. Dále bylo zjištěno, že při zvýšení úhlu dopadu laserového svazku dochází k nárůstu výšky i šířky vznikajících struktur. Vlnkovitá struktura se zachová i po naprášení vrstvy naprášení vrstvy zlata. Při goniometrickém měření bylo zjištěno, že po modifikaci povrchu laserem dochází k poklesu kontaktního úhlu a změně povrchové chemie. Struktury mohou nalézt uplantnění v povrchově zesílené Ramanově spektroskopii (SERS), seznorové elektronice či jako mechanicky pevné tkáňové nosiče.



Obr. 1 Nanostruktury indukované na povrchu polyethylennaftalátu (PEN) excimerovým laserem

Autoři děkují za finanční podporu grantu GAČR č. 13-06609S.

[1] J. Siegel, P. Slepička, J. Heitz, Z. Kolská, P. Sajdl, V. Švorčík, Gold nano-wires and nano-layers at laser-induced nano-ripples on PET, Appl. Surf. Sci. 256 (2010) 2205–2209.
[2] P. Slepička, A. Chaloupka, P. Sajdl, J. Heitz, V. Hnatowicz, V. Švorčík, Angle dependent laser nanopatterning of poly(ethylene terephthalate) surfaces, Appl. Surf. Sci. 257 (2011) 6021–6025.

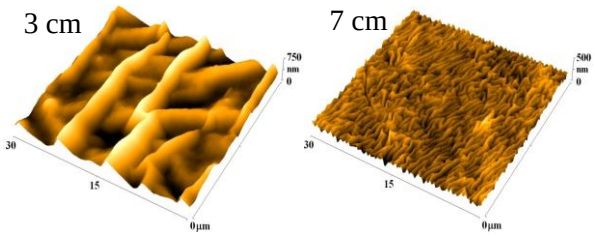
2Po34
UHLÍKOVÉ VRSTVY A NANOSTRUKTURY NA PLLA

Nikola Slepičková Kasálková[1], Martin Lenz[1], Petr Slepička[1], Václav Švorčík[1]

[1]Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha, nikola.kasalkova@vscht.cz

Uhlík se může vyskytovat ve třech možných hybridizacích, díky tomu může vytvářet velké množství více či méně pravidelných struktur s rozmanitými vlastnostmi. Cílem této práce byla příprava uhlíkových vrstev a studium jejich vlivu

na povrchové vlastnosti biopolymeru poly-L-mléčné kyseliny (PLLA). Uhlíkové vrstvy byly připraveny napařováním z uhlíkového vlákna s proměnnou vzdáleností vlákna od polymerního substrátu. Vybrané vzorky byly po modifikaci uhlíkem tepelně namáhány a byl studován vliv teploty skelného přechodu polymeru na vlastnosti samotného substrátu i uhlíkové vrstvy. Změny fyzikálně chemických parametrů povrchu byly studovány následujícími metodami. Množství naneseného uhlíku bylo stanoveno gravimetricky. Změna chemického složení povrchu byla studována pomocí goniometrie (měření kontaktních úhlů) a metody XPS (stanovení atomární koncentrace prvků). Povrchová morfologie a drsnost byla zjištěna pomocí AFM. Bylo zjištěno, že množství napařeného uhlíku lineárně klesá s rostoucí vzdáleností substrátu od zdroje. Nanesením uhlíku na PLLA resp. následným tepelným namáháním nedochází k výrazným změnám v hodnotách kontaktních úhlů. Tepelné namáhání má však významný vliv na změnu povrchové morfologie, dochází ke vzniku lamelární struktury, jejíž parametry jsou závislé na vzdálenosti substrátu od uhlíkového vlákna (obr 1).



Obr. 1 AFM skeny tepelně namáhaného substrátu PLLA s uhlíkovou vrstvou napařenou ze vzdálenosti 3 resp. 7cm.

Autoři děkují za podporu grantu GACR 108/12/G108.

2Po35
STUDY OF CHEMICAL AND MORPHOLOGICAL MODIFICATIONS OF MICA TREATED WITH ATMOSPHERIC PRESSURE SURFACE BARRIER DISCHARGES

Vadym Prysiazhnyi [1, 2], Monika Stupavská[1, 2], Mirko Černák[1, 2]

[1]R&D Centre for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications (CEPLANT), Kotlarska 2, 611 37 Brno, Czech Republic
[2]Masaryk University, Faculty of Science, Department of Physical Electronic, Kotlarska 2, 611 37 Brno, Czech Republic, stupavska@mail.muni.cz

X-ray photoelectron spectroscopy and atomic force microscopy measurements have been used to characterize the surface modifications of air-cleaved mica surfaces using diffuse coplanar surface barrier discharge plasma source (specific type of surface DBD) [1]. This plasma source was proven to be efficient for homogeneous surface treatments for several applications. The used mica was V1 quality, which ensures the minimum influence of material additives or structural defects. It has been shown that application of cold plasmas allowed to gently modify the surface, showing that the chemical modifications can be controlled by the plasma gas [2]. In this case gently should be understood as plasma application does not caused severe damage to the surface morphology. The current study presents comparison of air, nitrogen, hydrogen, argon and oxygen plasmas. The chemical compositions and analysis of high-resolution peaks will presented and discussed in detail.

This work was supported by the Program of „Employment of Newly Graduated Doctors of Science for Scientific Excellence“(grant number CZ.1.07/2.3.00/30.009) co-financed from European Social Fund and the state budget of the Czech Republic and by the project R&D Centre for Low-Cost Plasma and Nanotechnology Surface Modifications - CZ.1.05/2.1.00/03.0086 funding by the European Development Fund.

[1] Faculty of Mathematics, Physics and Informatics of Comenius University. Apparatus and method for surface finishing of metals and metalloids, metal oxides and metalloid oxides, and metal nitrides and metalloid nitrides. M. Cernak, P. Kus, A. Zahoranova. US Patent Application. US 20100015358 A1

[2] V. Prysiazhnyi, V. Zaporojchenko, H. Kersten, M. Cernak. Appl. Surf. Sci. 258 (2012) 5467– 5471.

2Po36
GENERÁCIA NANOČASTÍC KOVOV A ANORGANICKÝCH ZLÚČENÍN V IÓNOVÝCH KVAPALINÁCH.

Štefan Toma[1], Peter Lobotka[2], Ivo Vávra[2]

[1].*Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského Bratislava, Mlynská dolina CH-2, 842 15 Bratislava, toma@fns.uniba.sk*
[2]. *Elektrochemický ústav SAV, Dúbravská cesta9, 831 05 Bratislava, peter.lobotka@savba.sk*

Iónové kvapaliny sú soli kvarternizovaných dusíkatých zlúčenín (amínov, ako aj päťčlánkových a šesťčlánkovgých heterocyklov), ako aj kvarternizovaných fosfínov s takými aniónmi, ako sú Al_2Cl_6, BF_4, PF_6, OAc, OTf, $N(TF)_2$, $N(CN)_2$ a pod., ktoré majú teplotu topenia nižšiu ako 100 ^oC. Takéto kvapaliny sa vyznačujú tým, že majú prakticky nulovú tenziu pár, sú termicky stabilné až do 250- 300 ^oC, majú široké elektrochemické okno a dobre rozpúšťajú tak organické, ako aj anorganické zlúčeniny. V závislosti od aniónu môžu byť s vodou miesiteľné, alebo nemiesiteľné. Vzhľadom na vyššie uvedené vlastnosti nachádzajú iónové kvapaliny široké využitie najmä v organickej syntéze, ale našli už uplatnenie aj v technickej praxi. V mnohých prechodnými kovmi katalyzovaných reakciách sa dokázalo, že sa z katalyzátora v iónových kvapalinách tvoria kovové nanočastice, ktoré sa nezhlukujú do väčších agregátov. Tento poznatok viedol k využitiu iónových kvapalín, ako prostredia pri generácii nanočastíc kovov, resp. oxidov a chalkogenidov kovov[1/4]. Nanočastice kovov sa v nich obyčajne generujú, z vhodných prekurzorov, pôsobením redukčných činidiel, elektrodepozíciou, vysokou teplotou, mikrovlnným žiarením a zriedkavejšie aj fotochemicky. V rámci nášho výskumu sme sa zamerali na generáciu nanočastíc kovov, najmä Cu, Ag, Au, Ni, Fe fyzikálnou metódou – naprašovaním materialu vo vákuu na povrch iónovej kvapaliny.

Ďakujeme APVV za finnačnú podporu tohto výskumu v rámci projektu APVV-0593-11

[1] Patele J.M., Peng. X., Koenigsmann C., Xu Y., Karn B., Wong S.S., *Green Chem*. **2011**, *13*, 482
[2] Dupont J.C., *Acc. Chem. Res*. **2011**, *44*, 1223
[3] Freudemann D., Wolf S., Wolf M., Feldmann C., *Angew. Chem. Int. Ed*. **2011**, *5*0, 1105
[4] Li Z., Jia Z., Luan Y., Mu T., *Curr.Oppin. Solid State Mater. Chem*. **2008**, *12*, 1

2Po37
KASITERITOVÁ VIOLEŤ

Jakub Trojan, Lucie Karolová, Jana Luxová, Petra Luňáková, Marcela Zvonková

Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, Trojan-Jakub@seznam.cz

Číničité pigmenty se strukturou minerálu kasiteritu patří do XI. skupiny rozdělení vysokoteplotních pigmentů dle nomenklatury CPMA [1]. Mezi jejich nejvýznamnější vlastnosti patří kormě vysoké termické a chemické stability, také schopnost poskytovat s vhodnými chromofory zajímavé barevné odstíny.

Skupina kasiteritových pigmentů zahrnuje tři nejvýznamnější představitele. Jsou jimi kasiteritová šeď, žluť a kasiteritová violeť. Ta přitom představuje jediný vysokoteplotní pigment fialového zbarvení.

Pigment je založen na oxidu číničitém krystalizujícím v tetragonální soustavě [2]. Dopováním hostitelské mřížky ionty chromu lze docílit změnu v původně nebarevném odstínu na odstín fialový. Obecný vzorec má tvar $Sn_{1-x}Cr_xO_2$.

Syntéza pigmentu probíhala při teplotách 1350, 1400, 1450, 1500, 1550 a 1600°C. Doba výpalu činila 3h s rychlostí náběhu teploty 10°C/min. Koncentrace dopujícího chromu byla zvolena: x = 0,01; 0,03 a 0,05. Připravené pigmenty byly poté zhodnoceny z hlediska jejich barevných vlastností v kolorimetrickém prostoru CIE L*a*b* po aplikaci do organického pojiva a keramické glazury, dále velikosti částic a byly podrobeny rentgenové difrakční analýze.

Výsledky barevnosti prokázaly, že nejsytější odstíny poskytují pigmenty s koncentrací chromu 0,01. S rostoucí teplotou syntézy se zároveň snižuje jas připravených pigmentů. Velikost částic leží v intervalu splňujícím podmínku jejich použití pro keramické účely (3 – 15 μm). Výsledky rentgenové difrakční analýzy prokázaly převažující kasiteritovou strukturu.

Poděkování: Tento projekt vznikl za podpory SGFChT04 Univerzity Pardubice

[1] CPMA. Classification and chemical descriptions of the complex inorganic color pigments. Fourth Ed. Alexandria, Virginia: Color Pigments Manufacturers Association, 2010, pp. 22.
[2] SWILER, D.R. Inorganic Pigments. *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chem. Technol*. Vol. 19, 4 Ed. New York. John Wiley & Sons, Inc., 1996, pp. 1-40. ISBN 978-0471526889.

2Po38
PRÍPRAVA, VLASTNOSTI A ANTIUREÁZOVÁ AKTIVITA MEĎNATÝCH KOMPLEXOV SCHIFFOVÝCH ZÁSAD

Jindra Valentová, Marek Matuška, Zita Puterová, Ferdinand Devínsky

Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta Univerzity Komenského v Bratislave, valentova@fpharm.uniba.sk

Meďnaté komplexy medi Schiffových zásad sa pripravujú ako nízkomolekulové modely aktívnych centier enzýmov a tiež vykazujú aj schopnosť inhibície niektorých enzýmov, napr. lipoxygenázy, xantín oxidázy a ureázy [1,2].

Ureáza je metaloenzým katalyzujúci hydrolýzu urey na amoniak a oxid uhličitý. Zvýšená aktivita enzýmu ureázy pri infekciách ureolytickými baktériami, napr. *Helicobacter pyroli* spôsobuje bazického prostredie a zvýšenú tvorbu amoniaku a tak vzniká poškodenie sliznice gastrointestinálneho traktu. Inhibítory ureázy z radu anorganických zlúčenín sa medicínsky využívajú pri liečbe duodenálnych vredov.

Ako nové inhibítory ureázy sa pripravili komplexy Schiffových zásad odvodené od salicylaldehydu, 3-metoxysalicylaldehu a izo–mérnych kyselín amino–butánových. Komplexy tvoria štvorcovo pyramidálnu štruktúru, centrálny atóm medi je súčasťou dvoch chelátových kruhov, je spojený tridentátnym ligandom O,N,O´ Schiffovej zásady. Veľkosť chelátových kruhov je daná typom aminokyseliny. U komplexov s α-amino–butánovou kyselinou vzniká šesť- a päťčlánkový kruh, u komplexov s β-aminobutánovou sa vytvárajú dva šesťčlánkové kruhy a s γ-aminomáselnou vzniká šesť- a sedemčlánkový kruh.

Zmena v štruktúre komplexov sa výrazne odráža aj v rozdieloch v antiureázovej aktivity komplexov. Najvyššia inhibícia ureázy sa prejavila u komplexov s γ-aminomáselnou kyselinou. Všetky testované komplexy vykazovali rádovo vyššiu antiureázovú aktivitu ako kyselina acetohydroxámová, ktorá sa používa ako štandard inhibície ureázy.

Práca bola realizovaná za podpory grantu APVV č. 0202-10

[1] Poništ S., Valentová J., Bezáková L., Obložinský. *Neuro Endocrinoll. Lett. 27*, **2006**, 180.

[2] Zhong-Lu You, Da-Hua Shi, Chen Xu, Qiang Zhang, Hai-Liang Zhu. *Eur.J. Med. Chem. 43*, **2008**, 862.

2Po39
ŠTRUKTÚRNE A MAGNETICKÉ VLASTNOSTI HEUSLEROVEJ ZLIATINY NIMNSB

Zuzana Vargová[1], Tomáš Ryba[2], Rastislav Varga[2], Sergej Ilkovič[3], Marian Reiffers[3], Róbert Gyepes[4],

[1]*Ústav Anorganickej Chémie, Prír. Fak., UPJŠ,Moyzesová 11, 041 54 Košice, Slovenská republika, zuzana.vargova@upjs.sk*
[2]*Ústav Fyzikálnych Vied, Prír. Fak. Park Angelinum 9, 041 54 Košice, Slovenská republika*
[3]*Prešovská univerzita, Fak. Human. A Prír. Vied, 080 78 Prešov, Slovenská republika*
[4]*Ústav Chémie, Fakulta Vzdelavania, Univerzita J.Selye, Komárno, Slovenská republika*

Zliatiny na báze Heuslerových zliatín sú zaraďované medzi materiály s vysokou perspektivitou využitia v mnohých oblastiach praxe - akými sú magnetokalorické chladenie, spintronika, senzorika atď. Magnetické zliatiný o vhodnom chemickom zložení XYZ nám dovoľujú vhodne nastaviť magnetooptické, magnetokalorické a štruktúrne vlastností koncovej zliatiny [1]. Pre takéto magneto-elektrické polovičné Heuslerové zliatiny je typická oblasť, na ktorú sa výskum zameriava predovšetkým využitie tak nemagnetických polovodičov, supravodičov či ao aj termoelektrických zliatin [2].

Typickou zliatinou zo skupiny polovičných Heuslerových zliatin je zliatina o zložení NiMnSb. Zliatina s takýmto zložením sa pripravuje metódou Arc-Melting a následným niekoľkodňovým žíhaním [3]. Nová metóda rýchleho chladenia a kalenia však zaviedla možnosť rýchlej prípravy veľkého množstva Heuslerových zliatin.

V príspevku ukazujeme prípravu Heuslerovej zliatiny o chemickom zložení NiMnSb metódou rýchleho chladenia roztavenej predzliatiny – jej štruktúrne a magnetické vlastnosti. Štruktúrne vlastnosti a chemické zloženie zliatiny boli študované prostredníctvom práškovej X-ray charakterizácie a SEM/EDX analýzy. Magnetické vlastnosti (hysterézne slučky s aplikovaným magnetickým poľom pozdĺžnym a kolmým, teplotná závislosť magnetizácie) boli merané prostredníctvom VSM v Prešove.

Tento príspevok bol publikovaný za pomoci projektov NanoCEXmat No.ITMS 26220120035, Slovak VEGA Grant no.1/0060/13 a APVV-0027-11.

[1] T. Graf, C. Felser, S.S.P. Parkin: Prog. Solid State Chem. 39 (2011) 1
[2] A. Hirohata, M. Kikuchi, N. Tezuka, K. Inomata, J.S. Claydon, Y.B. Xu, G. van der Laan: Curr. Opin. Sol. State Mat. Sci. 10 (2006) 93
[3] F.Wang, T.Fukuhara, K.Maezawa, K.Nishimura, F.Shimuzu, S.Masubuchi: Jap.Journ. of Appl. Phys., 49 (2010) 25502-1-4.

2Po40
VLIV DOPUJÍCÍCH PRVKŮ NA ELEKTROKINETICKÝ POTENCIÁL RUTILOVÝCH PIGMENTŮ $(Ti,Cr,M)O_2$

Jan Večeřa[1], Petra Šulcová[1], Petr Mikulášek[2]

[1]Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, ČR, jan.vecera@student.upce.cz
[2]Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, ČR, petr.mikulasek@upce.cz

Stabilitu disperzí vyjadřuje elektrokinetický (zeta) potenciál definovaný jako potenciál částice určený na základě elektrokinetických jevů, což jsou jevy spojené s relativním pohybem pevných částic s elektrickou dvojvrstvou vůči roztoku. Elektrokinetický potenciál je pak potenciál na rozhraní pohyblivé (vnitřní) a nepohyblivé (vnější) vrstvy elektrické dvojvrstvy. Hranicí stability je hodnota ±30 mV [1–3].

Zeta potenciál byl měřen u rutilových pigmentů $Ti_{1-3x}Cr_xM_{2x}O_2$ (M = Sb, Nb, W a x = 0; 0,05; 0,10; 0,20; 0,30; 0,50) připravených z oxidů syntézou v tuhé fázi při teplotě výpalu 850, 950, 1050, 1150 °C. Během měření na základě elektroforetického rozptylu záření bylo do 20 ml 0,001 M roztoku KCl přidáno 32 mg pigmentu.

Nejstabilnější disperze (**nejzápornější** hodnoty zeta potenciálu) poskytují pigmenty s Sb a W při teplotě 1050 °C (-44 až -39 mV pro Sb a -43 až -19 mV pro W) a při složení x = 0,20 (-44 až -19 mV pro Sb a -38 až -22 mV pro W), kdežto pigmenty s Nb při teplotě 1150 °C (-43 až -35 mV) a x = 0,30 (-38 až -25 mV). Nejvíce stabilní disperze jsou postupně tvořeny pigmenty s Sb (-46 až -11 mV), Nb (-41 až -12 mV) a W (-38 až -6 mV).

Výzkum anorganických pigmentů je na pracovišti autorů podporován IGA Univerzity Pardubice (SGFChT04).

[1] Lidmila Bartovská, Marie Šišková: *Fyzikální chemie povrchů a koloidních soustav*. Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, ČR, 2010
[2] Malvern Instruments, Ltd.: *Zeta Potential – An Introduction in 30 Minutes*. Zetasizer Nano series technical note, Worcestershire, VB
[3] Aleš Panáček, Libor Kvítek: *Základy koloidní chemie*. Univerzita Palackého v Olomouci, ČR, 2007

2Po41
PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A CYTOTOXICKÁ AKTIVITA VANADOCENOVÝCH KOMPLEXŮ S BIPYRIDINY

[1]J. Vinklárek, [1]D. Stříbrná, [2]J. Honzíček, [1]Z. Padělková

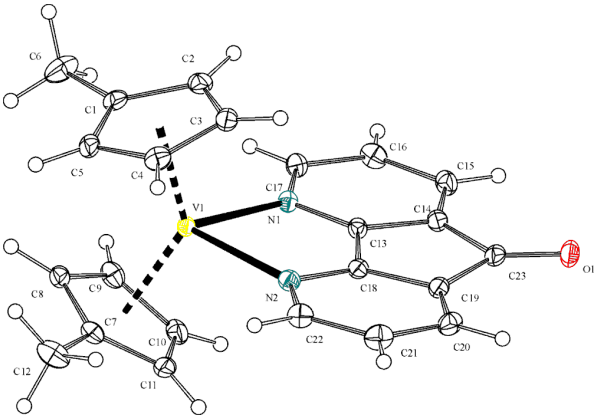
[1]Univerzita Pardubice, Katedra obecné a anorganické chemie, Studentská 573, 532 10 Pardubice, e-mail: jaromir.vinklarek@upce.cz; [2]Univerzita Pardubice, Ústav chemie a technologie makromolekulárních látek, Studentská 573, 532 10 Pardubice, tel. +420728 008 945,

Předchozí studia prokázaly vysokou stabilitu a cytostatickou aktivitu fenantrolinvanadocenových komplexů [1]. Na základě těchto výsledků byly připraveny, charakterizovány a biologicky testovány bipyridinvanadocenové sloučeniny. Tyto komplexy byly připraveny reakcí vanadocendichloridu se stříbrnou solí kyseliny trifluormethylsulfonové. Vzniklý reaktivní intermediát pak reaguje s příslušným 2,2´-bipyridinem. Touto metodou se podařilo připravit pět vanadocenových komplexů $[Cp_2V(bipy)][OTf]_2$ **(1a)**, $[Cp_2V(5,5´-Me_2bipy)][OTf]_2$ **(2a)**, $[Cp_2V(4,4´-Me_2bipy)][OTf]_2$ **(3a)**, $[Cp_2V\{4,4´-(MeO)_2bipy\}][OTf]_2$ **(4a)**, $[Cp_2V(4,5\text{-diazafluoren-9-on})][OTf]_2$ **(5a)** a pět 1,1´-dimethylvanadocenových komlexů $[(MeC_5H_4)_2V(bipy)][OTf]_2$ **(1b)**, $[(MeC_5H_4)_2V(5,5´-Me_2bipy)][OTf]_2$ **(2b)**, $[(MeC_5H_4)_2V(4,4´-Me_2bipy)][OTf]_2$ **(3b)**, $[(MeC_5H_4)_2V\{4,4´-(MeO)_2bipy\}][OTf]_2$ **(4b)**, $[(MeC_5H_4)_2V(4,5\text{-diazafluoren-9-on})][OTf]_2$ **(5b,** Obr. 1**)**.

Všechny syntetizované komplexy byly charakterizovány pomocí dostupných analytických metod – MS spektrometrie, IR a EPR spektroskopie. Především na základě výsledků EPR spektroskopie byla navržena struktura připravených sloučenin obsahující kladně nabitý vanadocenový fragment s chelátově vázaným bipyridinem, kompenzovaný dvěma

molekulami trifluormethylsulfonátu. V případě komplexů **3a**, **4a** a **5b** byla navržená struktura potvrzena RTG analýzou.

Všechny připravené sloučeniny byly na základě dobré rozpustnosti v terapeutických roztocích poskytnuty pro testy cytotoxické aktivity. Nejúčinnějšími testovanými cytostatiky byly komplexy **1a** s hodnotou IC_{50} 24 µmol/l pro MOLT-4 a 27 µmol/l pro HL-60 a **1b** s hodnotou IC_{50} 18 µmol/l pro MOLT-4 a 22 µmol/l pro HL-60. Tyto výsledky se již blíží standardně používanému cytostatiku *cis*-DDP ($Pt(NH_3)_2Cl_2$). Tyto výsledky s vědomím nižší toxicity vanadocenových komplexů dávají slušné vyhlídky pro další studium.



Obr. 1 RTG struktura dikationtu komplexu 5b

Tato práce vznikla za podpory SGFCHT 01/2013.

[1] Jaromír Vinklárek, Hana Hurychová, Jan Honzíček, et al.: European Journal of Inorganic Chemistry **14 (**2013) 2665-2672.

2Po42
DEPOZICE KOLOIDNÍCH ČÁSTIC NA POVRCHU SYNTETICKÉHO POLYMERU (ZEONOR) A SKLA POMOCÍ METODY IMPINGING JET

Jakub Vlček[1], Lubomír Lapčík[1], Jiří Čech[2]

[1] *Regionální centrum pokročilých materiálů a nanomateriálů, katedra fyzikální chemie, přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého 17 Listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká republika*
[2] *DTU Nanotech, Department of Micro- and Nanotechnology, Technical University of Denmark, Building 345 East DK-2800 Kongens Lyngby, Denmark*

Adsorbce, depozice a odstraňování koloidních částic a biologických látek na fázovém rozhraní kapalina/tuhá látka hraje důležitou roli v průmyslu např. pro lepší porozumění filtračního procesu, čištění vod, výroby papíru, povrchové úpravy umělých orgánů atd. Pro detailní a přesné porozumění výše zmíněného fenoménu je nutné během experimentu dodržovat přesně definované hydrodynamické a fyzikálně-chemické podmínky. Tyto kritéria splňuje depoziční technika Impinging Jet. V naší studii byly jako substrát pro Impinging Jet experimenty použity sklo a syntetický polymer Zeonor, který byl použit nemodifikovaný a modifikovaný pomocí mikro-embosování. Takto upravený Zeonor měl přesně definovanou strukturu povrchu, která byla charakterizována pomocí AFM, SEM a TEM. Experimentální měření kinetiky depozice bylo prováděno při běžné laboratorní teplotě a při vybraných režimech toku (Re v rozmezí 10 -20). Jako částice pro depozici byly použity PS částice s průměrem 1,1 µm (Sigma-Aldrich) s negativním nábojem – 20 mV, tato hodnota byla potvrzená měřením zeta potenciálu. Bylo zjištěno postupné zvyšování celkového počtu deponovaných částic se zvyšujícím se časem depozice. Obdržené kinetické křivky byly vyhodnoceny pomocí teoretického blokovacího modelu, ze kterého byl spočítán čas potřebný k dosažení rovnovážného stavu (blokovací čas).

Tato práce vznikla za podpory projektů OP VaVpI CZ.1.05/2.1.00/03.0058 a vnitřního grantu UP Olomouc PřF_2013_028.

[1] Adamczyk Zbigniew. 2006. Particles at Interfaces: Interactions, Deposition, Structure. Academic Press.
[2] Van de Ven Theo G.M. 1989. Colloidal hydrodynamic. Academic Press.
[3] Lapčík Lubomír Jr, Fraštík Michal and Lapčíková Barbora. 2012. International Journal of Heat and Mass Transfer 55: 1513-1518.

2Po43
MODIFIKACE OXIDOVANÉ CELULÓZY V PLAZMATICKÉM VÝBOJI

Vladimíra Vosmanská, Kateřina Kolářová, Silvie Rimpelová[1], Václav Švorčík

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav inženýrství pevných látek, Technická 5, 166 28 Praha, vosmansv@vscht.cz
[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Ústav mikrologie a biochemie., Technická 5, 166 28 Praha*

Oxidovaná forma celulózy je biologicky odbouratelný, resorbovatelný a biokompatibilní materiál s minimálními nežádoucími účinky na tkáně organismu. Současné použití tkví v hemostatické funkci, avšak dalším pozitivem tohoto biomateriálu je baktericidní působení proti široké škále patogenních mikroorganismů a podpora hojení ran.

V této práci byl studován vliv plazmatické modifikace na vlastnosti oxycelulózy, která byla oxidována do různého stupně. Změny chemického složení byly studovány rentgenovou fotoelektronovou spektroskopií (XPS) a infračervenou spektroskopií s Fourierovou transformací (FTIR). Změny povrchové morfologie byly sledovány skenovací elektronovou mikroskopií (SEM). Ablace a nasákavost oxycelulózy byly určeny z gravimetrických měření. Chování modifikovaných vzorků celulózy ve vodném prostředí a prostředí simulujícím lidské tělo (tj. fyziologický roztok) bylo zjišťováno potenciometrickým měřením pH. Antibakteriální vlastnosti modifikované a nemodifikované oxycelulózy byly studovány kapkovými a diskovými antibakteriálními testy za použití enviromentálních bakteriálních kmenů (Escherichia coli a Staphylococcus epidermidis). Účinnost byla srovnávána s antibiotickými standardy, chloramfenikolem a tetracyklinem.

Práce prokázala, že již při krátkém expozičním čase ve výboji argonového plazmatu dochází k dramatickým změnám zejména v chemickém složení vzorků [1]. S rostoucím časem expozice se zvyšuje nasákavost a ablace oxycelulózy, naopak dochází ke snižování pH jejich vodných roztoků. Oxidovaná celulóza s vyšším stupněm oxidace je více náchylná na degradaci polymerní struktury. Antibakteriální testy prokázaly, že kyselá reakce materiálů účinně zamezí růstu obou studovaných kmenů bakterií ve svém okolí.

Tato práce vznikla za finanční podpory GAČR díky projektu č. P108/12/1168.

[1] K. Kolářová, V. Vosmanská, S. Rimpelová, V. Švorčík, Cellulose 20 (2013) 953-961.

2Po44
PŘÍPRAVA A CHARAKTERIZACE NANOČÁSTIC SLITINY CU-AG

Vít Vykoukal[1], Aleš Stýskalík[1], David Škoda[1], Ondřej Zobač[1], Jiří Sopoušek,[1] Jan Vřešťál[1], Jiří Pinkas[1,*]

[1]*Ústav Chemie a CEITEC MU, Masarykova univerzita, Brno*
Tel: 420549496493; Fax:420549492443; E-mail: jpinkas@chemi.muni.cz

Teplota tání materiálu je závislá na velikosti částic. Nanočástice mají velkou povrchovou energii a tento fakt se u nich projevuje například ve značné depresi bodu tání.

V naší práci jsme se zabývali přípravou a charakterizací nanočástic slitiny mědi a stříbra. Cílem bylo ověřit pomocí kalorimetrického měření vypočtený fázový diagram pro nanočástice této slitiny, ve kterém byl zahrnut vliv poloměru částic.

Hlavní metodou přípravy byl solvotermální rozklad směsi vybraných prekurzorů kovů, které byly předrozpuštěny a poté rychle vneseny do směsi vyhřátých rozpouštědel. Rozpouštědla za vysoké teploty fungují jako redukční činidla i surfaktanty a brání růstu kovových nanočástic [1].

Vzniklé nanočástice byly charakterizovány různými fyzikálně-chemickými metodami. Významné jsou pro nás metody využívající dynamický rozpytl světla (DLS), maloúhlový rozptyl rentgenova záření (SAXS) a elektronová mikroskopie (TEM) pro stanovení velikosti nanočástic. Jednotlivé metody poskytují výsledky, které byly vzájemně porovnávány. Fázové změny byly charakterizovány metodou DSC. Pro určení chemického složení obálky nanočástic byly využity IR spektroskopie a MS spektrometrie a chemické složení bylo stanoveno metodou ICP-OES [2].

Autoři děkují LD11046, COST MP0903 a CEITEC CZ.1.05/1.1.00/02.0068 za finanční podporu.

[1] Y. ZHANG, W.HUANG, S. E. HABAS, J. N. KUHN, M.l E. GRASS, Y. YAMADA, P. YANG a G. A. SOMORJAI. Near-Monodisperse Ni-Cu Bimetallic Nanocrystals of Variable Composition: Controlled Synthesis and Catalytic Activity for H2 Generation. J. Phys. Chem. C. 2008, 112, 12092-12095.

[2] J. Sopousek, J. Vrestal, J. Pinkas, P. Broz, J. Bursik, A. Styskalik, D. Skoda, O.Zobač, J. Lee, Cu-Ni nanoalloy phase diagram – prediction and experiment, submitted to CALPHAD

2Po45
SYNTHESIS, STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND MAGNETIC PROPERTIES OF NANOSIZED COBALT CHROMITE

Dominika Zákutná[1,2], Daniel Nižňanský[1], Anton Repko[1], Irena Matulková[1], A. Ardu[3], Carla Cannas[3], Jana Vejpravová[2]

[1]*Department of Inorganic Chemistry Faculty of Sciences, Charles University, 128 43 Prague 2, Czech Republic*
[2]*Institut of Physics, Academy of Sciences of Czech Republic v.v.i, Na Slovance 2, 182 21 Prague 8, Czech Republic*
[3]*Università di Cagliari, Dipartimento di Scienze Chimiche, Complesso, Universitario di Monserrato, 09042 Monserrato (CA), Italy*

The nanosized cobalt chromite particles, which are a potentional multiferroic compound, were prepared by hydrothermal method of metal oleates in a mixture of solvents (ethanol, 1-pentanol). The reaction temperature of the hydrothermal treatment (200°C) was insufficient for the preparation of crystalline sample. Therefore, the samples were subsequently annealed on the air at temperatures from 300 to 500 °C.

The obtained nanoparticles were characterized by Powder X-ray Diffraction (PXRD), Transmission Electron Microscopy (TEM), High Resolution Transmission Electron Microscopy (HRTEM), Scanning Electron Microscopy (SEM), Raman and Infrared Spectroscopy (IR) and magnetic measurements.

The PXRD measurements confirm the presence of $CoCr_2O_4$ in the sample. From PXRD, the particles size was determinated using the Scherrer equation and Rietveld analysis. From TEM images, the particles size in the range of 4 - 16 nm, were obtained. TEM images showed that the particles had a tendency to form the aggreates during annealing.

Then, the samples were characterized by magnetic measurements. Zero field cooled (ZFC) and field cooled (FC) measurements show glassy-like behaviour. The value of T_f shifts towards lower temperature with the decreasing particle size. Hysteresis loops show moderate hysteresis ($\mu_0 \cdot H \sim 0.4$ T) and the curves have no trend to saturation up to 7 T.

This work was supported by the Grant Agency of the Czech Republic under project no. P108/10/1250 and by the Long Term Research Plan of the Ministry of Education of the Czech Republic (MSM0021620857).

2Po46
MODIFIED PHOTOACTIVE POLYSTYRENE NANOFIBERS.

Petr Henke[1], Pavel Kubát[2], Jiří Mosinger[1,3]

[1] *Faculty of Science, Charles University in Prague, Hlavova 2030, 128 43 Prague 2, Czech Republic*
[2] *J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, v.v.i., Academy of Sciences of the Czech Republic, Dolejskova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic*
[3] *Institute of Inorganic Chemistry, v.v.i., Academy of Sciences of the Czech Republic, 250 68 Rez, Czech Republic*

The electrospun nanofiber materials with an encapsulated photosensitizer efficiently photogenerate singlet oxygen, which is able to oxidize external chemical and biological substrates /targets [1,2]. Herein we present new types of elektrospun polystyrene (PS) nanofibers materials. Sulfonated polystyrene nanofiber materials with externally bound cationic photosensitizer 5,10,15,20-tetrakis(1-methyl-4-pyridinio)porphyrin tetra(p-toluenesulfonate) [3] and PS nanofiber materials with encapsulated nonpolar meso-tetraphenylporphyrin with post-electrospinning modification for increased surface wettability. The wettability of hydrofobic PS nanofiber materials was also modified by sulfonation, RF oxygen plasma and by polydopamine-coating. The increased wettability of PS nanofiber materials leads to increase of photooxidation of external substrates and antibacterial activity on the surface. The materials were studied by microscopic methods, steady state and time-resolved absorption and fluorescence spectroscopy. All nanofibers materials exhibited photogeneration of singlet oxygen and singlet oxygen mediated delayed fluorescence (SODF). Prompt and SODF was used as a sensitive tool for estimation of an optimal amount of externally bond photosensitizer for maximum generation of singlet oxygen. Doped sulfonated PS nanofibers exhibit the oxidation of an external substrate and antibacterial activity against *E. coli*. when activated by visible light. Extensive sulfonation of nanofibers is also associated with postpolymerization crosslinking effect increasing the resistence of nanofiber material to nonpolar media.

The research was supported by the Czech Science Foundation projects 13-12496S and by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (MSM 0021620857).

[1] Jiří Mosinger, Oldřich Jirsak, Pavel Kubat, Kamil Lang, Bedřich Mosinger: J. Mater. Chem., (2007)
[2] Jiří Mosinger, Kamil Lang, Pavel Kubat, Jan Sykora, Martin Hof, Lukáš Plistil, Bedřich Mosinger: J. Fluoresc., (2009)
[3] Petr Henke, Kamil Lang, Pavel Kubat, Miroslav Šlouf, Jiří Mosinger: ACS Appl. Mater. Interfaces (2013)

2Po47
PREPARATION AND PROPERTIES OF $CD_XZn_{1-X}S$ AND CORE/SHELL CdS/ZnS NANOPARTICLES

Petr PRAUS, Ladislav SVOBODA

VŠB – Technical University of Ostrava, 17. listopadu 15, 708 33, Ostrava-Poruba, petr.praus@vsb.cz

$Cd_xZn_{1-x}S$ and core/shell CdS/ZnS nanoparticles were synthesised by precipitation of zinc and cadmium cations by sodium sulphide in the presence of a cationic surfactant cetyltrimethylammonium bromide (CTAB). A suitable concentration of CTAB was chosen to be higher than its critical micellar concentration to form micelles into which the nanoparticles were encapsulated. Thus, CTAB formed a protecting cover around these nanoparticles avoiding their agglomeration.

$Cd_xZn_{1-x}S$ nanoparticles were synthesised by precipitation of zinc and cadmium cations mixtures by sodium sulphide in the presence of CTAB. UV-VIS absorption spectra of $Cd_xZn_{1-x}S$ colloid dispersions were recorded and their band-gap energies (E_{bg}) were estimated using the Tauc approach [1]. Radii (R) of the nanoparticles were calculated using a dependence of E_{bg} on R [2] involving a quantum confinement effect occurring in semiconductor quantum dots. Band-gap energies of $Cd_xZn_{1-x}S$ nanoparticles were calculated and correlated with their composition.

Core/shell CdS/ZnS nanoparticles were prepared by i) synthesis of CdS nanoparticles serving as cores and, consequently, ii) precipitation of ZnS shells of different thickness on these cores. CdS/ZnS nanoparticles were previously modelled in the Material Studio environment to found the amounts of CdS and ZnS molecules necessary for their preparation. The prepared nanoparticles were characterized by electron transmission microscopy, X-ray powder diffractometry, UV-VIS absorption and luminescence spectrometry. Tunnelling of electrons through ZnS shells was investigated by the photocatalytic decomposition of Methylene Blue under UV irradiation using CdS/ZnS nanoparticles as photocatalysts. Experimental results were compared with theoretical calculations.

Acknowledgement: This work was supported by the Czech Science Foundation (P107/11/1918), the Regional Materials Science and Technology Centre (CZ.1.05/2.1.00/01.0040) in Ostrava and by VŠB-Technical University of Ostrava (student's grants SP2013/56 and SP2013/64).

[1] J. Tauc, (Ed.), Amorphous and Liquid Semiconductors, Plenum Press, New York, 1974.
[2] L.E. Brus, J. Chem. Phys. 80 (1984) 4403.

POSTERY - SEKCIA 3
ORGANICKÁ CHÉMIA A POLYMÉRY

3Po01
SHAPE CONTROL OF GOLD NANOPARTICLES IN ORGANIC SOLUTION

Monika Benkovičová[1], Peter Šiffalovič[1], Mário Kotlár[1,2], Matej Jergel[1], Eva Majková[1]

[1]*Institute of Physics, Slovac Academy of Sciences, Dubravska cesta 9, 845 11 Bratislava, Slovak Republic*
[2]*Faculty of Electrical Engineering and Information Technology, Slovak University of Technology, Ilkovicova 3, 812 19 Bratislava, Slovak Republic*

The control of metallic nanostructures in terms of the size and morphology has attracted much attention in recent years due to the possibility of a precise tuning of electronic, optical, and catalytic properties. In particular, gold nanoparticles have been widely studied because of their high chemical and thermal stability, scattering character due to an intense surface plasmon resonance and ease of synthesis [1, 2].

We report on a very simple method of the shape and size control of gold nanoparticles based on thermal decomposition and reduction of metal precursor (chloroauric acid) in the presence of a stabilizing capping agent which is very slowly injected into a hot solvent. The nanoparticles withouth the stabilizing agent would form uncontrolled aggregates during the growth process. The nanoparticle size and shape are strongly dependent on the type and concentration of the stabilizer in the reaction mixture. For the preparation of hydrophobic spherical gold nanoparticles in toluene, oleylamine was used as the stabilizer. Hydrodynamic nanoparticle diameter in the colloidal solution measured by the dynamic light scattering was 14.6 nm. The nanoparticle shape and local ordering in the self-assembled arrays on silicon substrate were studied by scanning electron microscopy. Cube, truncated cube, tetrahedron and spheroidal shapes were prepared using polyvinylpyrrolidone with different concentrations in the presence of $AgNO_3$ in 1,5 - pentanediol.

[1] Seo D., Park J.Ch., Song H.: J. AM. CHEM. SOC. (2006), 128, 14863-14870. DOI: 10.1021/ja062892u.
[2] Benkovičova M., Vegsö K., Šiffalovič P., Jergel M., Majkova E., Luby Š., Šatka A.: Chemical Papers (2013), 67, 1225–1230. DOI: 10.2478/s11696-013-0315y.

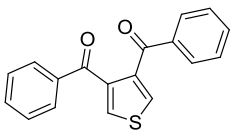
3Po02
SYNTHESIS, STRUCTURE AND REACTIVITY OF 3,4-DIBENZOYLTHIOPHENES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS

Jana Boržíková[a], Jozef Kožíšek[b] and Daniel Végh[a],

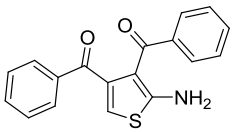
[a] *Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*
[b] *Institute of Physical Chemistry and Chemical Physics, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*
email: borzulka@gmail.com, daniel.vegh@stuba.sk

Well defined thiophene and oligothiophene derivatives are important compounds for biological studies, polymer research , electronic semiconducting materials, non linear optical materials, light emitting diodes, and highly ordered molecular assemblies[1-3]. They showed antifungal and antibacterial activity and worked as promising inhibitors of tau protein, which is responsible for Alzheimer's disease.[2,3]

Towards this goal, we have developed a simple synthetic methodology and prepared a series of 3,4-dibenzoylsubstituted thiophenes (**1**,**2**) as starting materials for synthesis of new pi-conjugated heterocycles. Amino group and benzoyl substituents affords to a large variety of subsequent reactions (*Friedlander, Gewald, Wolff-Khisner, Haller-Bauer, Beckmann, Paal-Knorr,..).*



1



2

The prepared new compounds can be used as biologically active compounds and building blocks for novel materials with optoelectronic properties and supramolecular structure in solid state.

Structures of target compounds were proved by IR, UV, ^{1}H NMR, ^{13}C NMR spectral methods and by X-ray analysis.

This work was financially supported by grant from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/0660/11, 1/0679/11 APVV agency project 0038-11 and Research Center for Industrial Synthesis of Drugs, ITMS 26240220061, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

[1] Handbook of Conducting Polymers, second ed., in: Stockheim T.A., Elsembaumer, R.L., Reynolds J.H. (Eds.), Marcel Decker, Inc., New York, 1998.
[2] Aly H.M et al., *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2011, 46, 4566-4572
[3] Ballatore C. et al., *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, 20, 4451-4461

3Po03
PD (II) KATALYZOVANÁ SPIROCYKLIZÁCIA INDOLOVÉHO FYTOALEXÍNU BRASINÍNU A JEHO 1-SUBSTITUOVANÝCH DERIVÁTOV

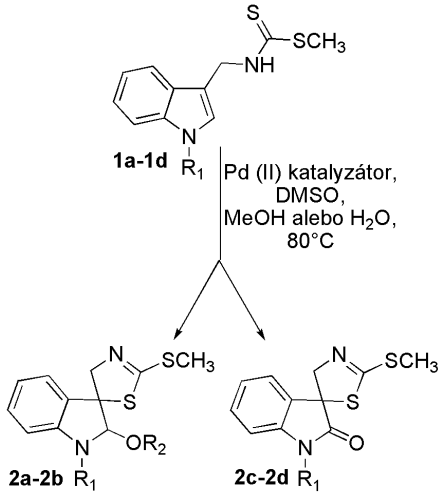
Mariana Budovská[1]

[1]*Univerzita P.J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovensko, mariana.budovska@upjs.sk*

Spiroindolínové fytoalexíny, syntetizované a akumulované v rastlinách čeľade *Kapustovité* (*Brassicaceae*) *de novo* ako odpoveď na biotický alebo abiotický stres, predstavujú zaujímavú a štruktúrne neobvyklú skupinu prírodných látok s antimikrobiálnou, protirakovinovou a antitrypanozomálnou aktivitou [1, 2].

Brómom iniciovaná spirocyklizácia 1-metoxy- a 1-Boc-brasinínu (**1a, 1b**) s vodou alebo metanolom ako nukleofilom poskytuje racemáty spirozlúčenín **2a** a **2b** [3]. V prípade brasinínu (**1c**) a jeho 1-metylderivátu **1d** touto metódou v prítomnosti vody vznikajú rozkladné produkty, avšak v zmesi dioxán-metanol dochádza k premene na racemát spirobrasinínu (**2c**) a 1-metylspirobrasinínu (**2d**).

Cieľom práce bolo preskúmať cyklizáciu brasinínu a jeho derivátov **1a-1d** za využitia paládia ako katalyzátora. Tento prístup k cyklizačným reakciám zlúčenín síry je zriedkavý, pravdepodobne pre obavy z otravy katalyzátora sírou. Spirocyklizáciu brasinínu a jeho derivátov **1a-1d** možno dosiahnuť použitím paládiového katalyzátora Pd (II) v DMSO pri 80°C v prítomnosti vody alebo metanolu. Cyklizácia 1-metoxy- a 1-Boc-brasinínu (**1a, 1b**) katalyzovaná $PdCl_2(CH_3CN)_2$ poskytuje produkty **2a** a **2b**. Spirocyklizáciou brasinínu (**1c**) a jeho 1-metylderivátu **1d** účinkom $PdCl_2(CH_3CN)_2$ sa získa spirobrasinín **2c** a 1-metylspirobrasinín **2d**.



R_1 = a) OCH_3, b) Boc, c) H, d) CH_3
R_2 = a) H, b) CH_3

Obr. 1

Táto práca vznikla za podpory VEGA grantu 1/0954/12 a VVGS-PF-2012-31.

[1] M. S. C. Pedras, E. E. Yaya, E. Glawischnig: Nat. Prod. Rep. 28, 1381 (2011).
[2] R. Mezencev, M. Galizzi, P. Kutschy, R. Docampo: Experimental Parasitol. 122, 66 (2009).
[3] P. Kutschy, M. Suchý, K. Monde, N. Harada, R. Marušková, Z. Čurillová, M. Dzurilla, M. Miklošová, R. Mezencev, J. Mojžiš: Tetrahedron Lett. 43, 9489 (2002).

3Po04
VLIV BOTNÁNÍ HYDROGELŮ HYALURONANU NA JEJICH MECHANICKÉ VLASTNOSTI

J. Bystroňová[1], L. Wolfová[1], M. Pravda[1], V. Velebný[1]

[1]*Contipro Biotech s.r.o., Dolní Dobrouč 401, 561 02, Česká republika, wolfova@contipro.com*

Jednou ze slibných možností využití kys. hyaluronové (HA) a jejích derivátů je příprava hydrogelů sloužících jako scaffoldy pro kultivaci buněk [1]. Součástí popisu vlastností těchto materiálu je stanovení jejich botnavosti za fyziologických podmínek. Tato data mají přinést informaci o tom, jakým způsobem se připravované hydrogely mohou chovat po umístnění do kultivačního média, případně po implantaci do organismu. Nabotnání hydrogelů kromě zvětšení jejich objemu vede také ke změně jejich mechanických vlastností, popř. umožňuje migraci implementovaných buněk ven z těchto ze struktury hydrogelu. To může mít negativní efekt na výsledné vlastnosti implantátu a úspěšnost léčby. V této práci se věnujeme hydrogelům na bázi tyraminovaného derivátu HA, který je schopen podstupovat síťovací reakci pomocí

křenové peroxidázy (HRP) a peroxidu vodíku [2]. Vlastnosti těchto hydrogelů jsou ovlivněny Mw a stupněm substituce výchozího derivátu HA, jeho koncentrací a koncentrací síťujících činidel. U vyvíjených hydrogelů bylo nutné posoudit vliv těchto faktorů na jejich parametr botnání. Cílem bylo zoptimalizovat přípravu hydrogelu tak, aby materiál při kontaktu s fyziologickým vykazoval minimální botnavost.

Tento projekt byl realizován za finanční podpory z prostředků státního rozpočtu prostřednictvím Ministerstva průmyslu a obchodu - Programový projekt výzkumu a vývoje TIP FR-TI4/259

[1] Lee, K.Y. and D.J. Mooney: Chem Rev 101, 1869-1880 (2001)
[2] Wolfova, L.; Pravda, M.; Nemcova, M.; Velebny, V.: J Tissue Eng Regen Med 6, 191 (2012).

3Po05
BIOLOGICAL EFFECTS OF MEDICINAL PLANTS USED IN TRADITIONAL MEDICINE FOR RESPIRATORY DISEASES

Peter Capek[1], Martina Šutovská[2], Soňa Fraňová[2], Jozef Turjan[1], Ján Kozák[1]

[1]*Institute of Chemistry, Center for Glycomics, Slovak Academy of Sciences, Bratislava, Slovakia,* chemcape@savba.sk, [2]*Department of Pharmacology, Jessenius Faculty of Medicine, Comenius University, Martin Slovakia*

Herbal medicine is the most popular form of traditional medicine and comprises known medicinal plants, their preparations and products containing active ingredients for healing purposes. It is estimated that in some continents, a high percentage of the population (~80%) relies on traditional medicine only. Similarly, in many developed countries over 70% of the population has used some form of traditional medicine nowadays. Medicinal plants used for treatment of respiratory diseases represent relatively a small group. Their currative effects were evaluated only on the basis of the empirical practice and therefore pharmacological techniques were applied to quantified and evaluate parameters of antitussive and bronchodilatory effects of herbs used in herbal medicine. Pharmacological tests were focused on the verification of possible effects of mucilages and glycoconjugates isolated from some medicinal plants (*Althaea officinalis* L., *Lythrum salicaria* L., *Solidago canadensis* L., *Opilia celtidifolia, Trichilia emetica* Vahl., and *Crossopteryx febrifuga* Benth).

Acknowledgment.This work was supported by the VEGA Grant No. 2/0017/11 and this contribution is the result of the project implementation: Centre of Excellence for Glycomics, ITMS 26240120031, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

3Po06
PORFYRIN-STEROIDNÍ SLOUČENINY PRO VRSTVY LANGMUIRA-BLODGETOVÉ

Lenka Cardová[1], Raffaella Lettieri[2], Mariano Venanzi[2], Pavel Drašar[1]

[1] *Vysoká škola chemicko technologická, Technická 5, 166 28 Praha 6, cardova.lenka@gmail.com*
[2] *Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Universita Roma Tor Vergata, 00133 Rome, Italy*

Metoda přenosu organizovaných monovrstev, tvořených amfifilními molekulami, z vodní hladiny na podložku byla poprvé popsána počátkem 20. století a po svých objevitelích pojmenována Langmuirova-Blodgetové. V současné době je tato technika zmiňována mimo jiné v souvislosti s biosenzory, membránami, (polo)vodiči, samoskladbou či nanomateriály [1,2].

Tato práce je zaměřena na syntézu porfyrin-steroidních konjugátů za účelem studia samoskladby a LB vrstev. Pro experimenty byla připravena série látek ze dvou stavebních bloků – žlučové kyseliny a porfyrinu. Kombinace jejich vlastností - tedy amfifilního chrakteru žlučových kyselin a π-π interakcí porfyrinového jádra - za použití LB techniky poskytuje vysoce organizované, opticky aktivní a elektricky vodivé struktury. Ty byly proměřeny pomocí UV-VIS, CD a fluorescenční mikroskopie a byl zkoumán vliv strukturních změn na tvorbu LB filmů. Syntetizované sloučeniny se navzájem liší vazbou (ester, amid, ether), pozicí vazby porfyrinu vůči žlučové kyselině (*para-*, *meta-*) i samotnou žlučovou kyselinou (cholová, lithocholová).

Práce byla podpořena projekty MŠMT ČR MSM6046137305, a GA ČR 304/10/1951 a P503/11/0616.

[1] Acharya S.; Hill J. P.; Ariga K.: Advanced Materials *29*, 2959 (2009).
[2] Zasadzinski J. A., Viswanathan R., Madsen L., Garnaes J., Schwartz D. K.: Science *263*, 1726 (1994).

3Po07
NÁVRH A SYNTÉZA DERIVÁTOV BITIAZOLU URČENÝCH PRE OFET N-TYPU

Ľuboš Cehlárik, Peter Magdolen

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, cehlarik@fns.uniba.sk

Tranzistory riadené elektrickým polom (OFET) sú zariadenia, ktoré pozostávajú z organickej polovodičovej vrstvy, izolačnej vrstvy a troch elektród (*source, drain, gate*). Nie sú iba základné stavebné bloky pre sľubnú generáciu lacných a flexibilných organických integrovaných obvodov, ale taktiež poskytujú dôležité informácie o prenose náboja π-konjugovaných systémov. Sú dôležité pre výskum vzťahov medzi štruktúrou a vlastnosťami π-konjugovaných systémov, ako je elektrónová mobilita, prahové napätie a elektrický prúd aplikovaný na organický polovodič. OFET majú uplatnenie v rádiofrekvenčných zariadeniach, flexibilných displejoch, senzoroch, atď. [1] Bitiazolové jednotky s trifluórmetylovými a trifluór–metylfenylovými jednotkami patria medzi hlavných kandidátov pre OFET. Navrhli sme a pripravili základný bitiazolový derivát **3** s trifluórmetylfenylovými skupinami. Ďalej sme navrhli bitiazolovú jednotku premostenú sírou, fosforom a dusíkom. Z tejto série sme pripravili sírou premostený derivát **4**.

[1] Wang, Ch.; Dong, H.; Hu, W.; Liu, Y.; Zhu, D. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 2208-2267.

3Po08
RÔZNE IZOMÉRNE BENZOBISTIAZOLOVÉ SOLI AKO POTENCIÁLNE NLO MATERIÁLY

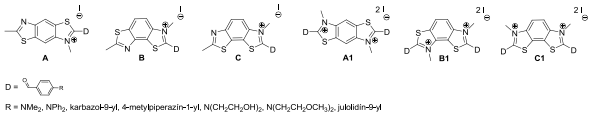
Alexandra Čibová[1], Peter Magdolen[1]

[1]*Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká Fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika, cibovaa@fns.uniba.sk*

Materiály na báze organických *push-pull* systémov sú známe svojimi nelineárno-optickými (NLO) vlastnosťami porovnateľnými s bežnými anorganickými. Ich výhodou je rýchlejšia polarizovateľnosť, nižšie dielektrické konštanty a kompatibilnosť s polymérnymi matricami.

Konjugované **donor** (D) - **akceptor** (A) - **donor** (D) štruktúry s centrálnym benzobistiazolovým skeletom zaručujú požadované mechanické vlastnosti a stabilitu. Planárne aromatické systémy podmieňujú vysokú delokalizáciu s možnosťou transportu náboja s potenciálnym využitím v optoelektronike a fotonike. Predpovedané priaznivé NLO vlastnosti benzotiazolových [1] a benzobistiazolových [2] solí boli experimentálne potvrdené.

V snahe rozšíriť škálu študovaných zlúčenín sme syntetizovali rôzne substituované izomérne benzobistiazolové soli **A**, **B**, **C** so zlepšenými optoelektronickými a fluorescenčnými vlastnosťami (obr. 1).



Obr. 1 Pripravené benzobistiazolové soli.

Kľúčovou reakciou je kondenzácia aldolového typu medzi aromatickými aldehydmi a benzobistiazolovými soľami s aktívnou metylovou skupinou. Benzobistiazolové soli sa pripravujú z izomérnych fenyléndiamínov acyláciou, tionáciou a oxidačnou cyklizáciou. Následnou derivatizáciou benzobistiazolovej jednotky s vybranými donornými aldehydmi získavame série zlúčenín, u ktorých očakávame priaznivé NLO vlastnosti tretieho poriadku, najmä dvojfotónovej absorpcie.

Vzťah medzi chemickou štruktúrou a NLO vlastnosťami pripravených zlúčenín bude študovaný meraním emisných a absorpčných charakteristík v UV-VIS oblasti. V spolupráci s Katedrou mikroelektroniky pri Fakulte elektrotechniky a informatiky STU v Bratislave sa uskutočňuje aj meranie elektronických vlastností po vytvorení elektronických prvkov (OLED a OFET).

[1] Veronika Hrobáriková, Peter Hrobárik, Peter Gajdoš, Ioannis Fitilis, Mihalis Fakis, Peter Persephonis, Pavol Zahradník: J. Org. Chem., (2010)
[2] Alexandra Čibová, Peter Magdolen, Andrea Fülöpová, Pavol Zahradník: Chem. Papers, (2013)

3Po09
SYNTHESIS OF TETRAZOLE DERIVATIVES WITH PROMISING ANTIMYCOBACTERIAL EFFECT

Patrik Čonka[1], Jaroslav Roh[1], Alexandr Hrabálek[1]

[1]*Charles University in Prague, Faculty of Pharmacy in Hradec Králové, Department of Inorganic and Organic Chemistry, Heyrovského 1203, 50005 Hradec Králové, Czech Republic;* conkap@faf.cuni.cz

Tetrazoles and their derivatives are known to posses diverse pharmacological activities. They

are used extensively as isosteric replacement for carboxylic acids in medicinal chemistry. Tetrazoles were, among other things, identified as a important part of very active antituberculotic molecules in the last years.

In this work we dealt with the synthesis of 1-alkyl-5-benzylsulfanyl-1*H*-tetrazoles **1** and 2-alkyl-5-benzylsulfanyl-2*H*-tetrazoles **2** (Figure 1), with specific substituents R^1 on benzyl moiety and various substituents R on tetrazole ring.

Figure 1. Antimycobacterially active compounds on the tetrazole basis

Antimycobacterial activity of the prepared compounds were evaluated and several of them exhibited high antimycobacterial activity against four mycobacterial strains. These results showed that benzyl part of the molecule is probably responsible for pharamcodynamic effect, whereas substituted tetrazole is responsible for the pharmacokinetics.

The work was supported by the European Social Fund and the state budget of the Czech Republic. Project no. **CZ.1.07/2.3.00/30.0061**

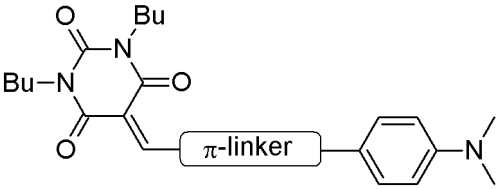
3Po10
SYSTEMATICKÁ MODIFIKACE Π-KONJUGOVANÉ CESTY V PUSH-PULL CHROMOFORECH S *N*,*N´*-DIBUTYLBARBITUROVOU KYSELINOU JAKO AKCEPTOREM

Milan Klikar,*Daniel Cvejn, Filip Bureš

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 53210 Pardubice, Milan.Klikar@seznam.cz

Cílem práce je syntéza a studium vztahů typu struktura-vlastnosti v push-pull chromoforech se systematicky prodlužovanou π-konjugovanou cestou. Jako donorní část byla využita *N*,*N*-dimethylamino skupina, *N*,*N´*-dibutylbarbiturová kyselina slouží jako akceptor (Obr. 1). V těchto D-π-A systémech dochází k intramolekulárnímu přenosu náboje z donorní Me_2N skupiny přes π-konjugovaný systém násobných vazeb (π-linker) do akceptorní *N*,*N´*-dibutylbarbiturové jednotky, čímž se molekula polarizuje. Přímá D-A interakce (HOMO→LUMO) dává vzniknout novému nízkoenergetickému molekulovému orbitalu s jednoduchou excitací elektronů ve viditelné oblasti spektra. Intenzivní zbarvení (chromofor) a nelineárně optické (NLO) vlastnosti druhého či třetího druhu jsou vlastnosti využitelné v optoelektronických zařízeních. Další aplikace takovýchto barviv skýtá studium potenciálu buněčných membrán.

V příspěvku bude diskutována příprava, RTG analýza, elektrochemie, absorpční UV/Vis spektra, výpočetní metody a EFISH experiment. Z naměřených dat budou vyvozeny vztahy struktura-vlastnosti.[1]



Obr. 1 Push-pull chromofory s barbiturovou kyselinou jako akceptorem.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou ČR (13-01061S) a Technologickou agenturou ČR (TE01020022, Flexprint).

[1] Klikar M., Bureš F., Pytela O., Mikysek T., Padělková Z., Barsella A., Dorkenoo K., Achelle S. *New. J. Chem.* **2013**, zasláno.

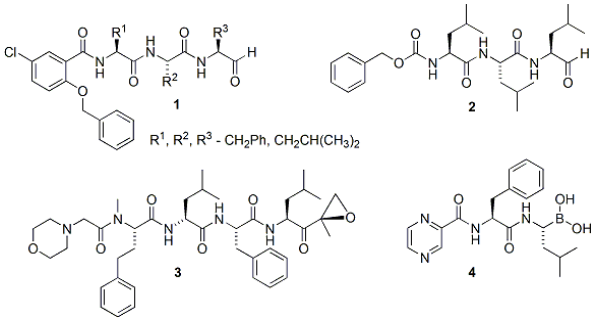
3Po11
SYNTÉZA NOVÝCH POTENCIÁLNÍCH INHIBITORŮ PROTEASOMU NA BÁZI TRIPEPTIDŮ

Jan Dušek[1], Aleš Imramovský[1], Radek Jorda[2,3], Eva Řezníčková[2], Vladimír Kryštof[2], Miloš Sedlák[1]

[1]Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, jan.dusek87@gmail.com
[2] Laboratoř růstových regulátorů, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého a Institut experimentální botaniky AV ČR, Šlechtitelů 11, 78371 Olomouc
[3] Regionální centrum pro aplikovanou molekulární onkologii, Masaryk Memorial Cancer Institute, Žlutý kopec 7, 65653 Brno

O-Benzyl-5-chlorsalicyl-tripeptid aldehydy (**1**) jsou originální organické látky zamýšlené jako inhibitory proteasomu. Inhibice proteasomu je jedna z perspektivních metod léčby nádorových onemocnění. *O*-Benzyl-5-chlorsalicyl-tripeptid aldehydy jsou syntetizovány na základě zkušeností z dosavadních prací s přípravou peptidových vazeb pomocí karbodiimidů a po vzoru látek jako jsou MG-132 (**2**), carfilzomib (**3**, PR-171, Kyprolis) nebo bortezomib (**4**, Valcade).

Výše jmenované látky se nacházejí v současné době v různých fázích klinických testů nebo jsou již komerčně dostupné.



Obr. 1 Přehled potencionálních, testovaných a dostupných inhibitorů proteasomu

Syntéza vychází z *O*-benzyl-5-chlorsaliclové kyseliny a methylesterů hydrochloridů aminokyselin. Amidická vazba je utvářena pomocí *N*-(3-dimethylaminopropyl)-*N´*-ethylkarbodiimidu hydrochloridu (EDCI·HCl), 1-hydroxybenzotriazolu (HOBt) a *N*,*N*-diisopropylethylaminu (DIPEA).

Při syntéze peptidového řetězce docházelo k částečné racemizaci a vzniku směsi diasteroizomerů. Zabránění racemizace, přesná stereospecfická syntéza a jednoznačný produkt jsou cíle dosažitelné vhodnou úpravou reakčních podmínek, které budou diskutovány v rámci příspěvku.

Látky budou testovány jako inhibitory proteasomu, inhibitory proteinkináz, bude studován druh způsobované apoptózy a v neposlední řadě i antimikrobiální aktivita.

Autoři děkují Studentským grantovým projektům Fakulty chemicko-technologické Univerzity Pardubice. (SG FCHT 002) za finanční podporu.

[1] Aleš Imramovský, Juana M. Férriz, Karel Pauk, Martin Krátký, Jarmila Vinšová: J. Comb. Chem, *12*, 414-416 (2010)

[2] Celia R. Berkers, Yves Leestemaker, Karianne G. Schruurman, Bruce Ruggeri, Susan Jones-Bolin, Michael Williams, Huib Ovaa: Mol. Pharmaceutics, *9*, 1126-1135 (2012)

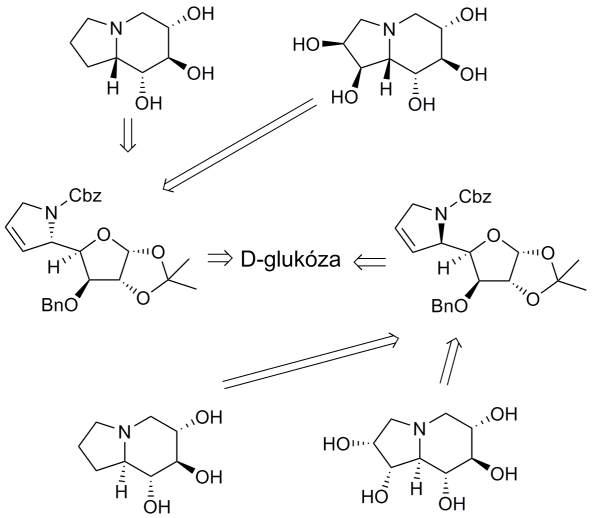
3Po12
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA INDOLIZIDÍNOVÝCH IMINOSACHARIDOV Z D-GLUKÓZY

Ján Elečko[1], Miroslava Martinková[1], Jozef Gonda[1]

[1]*Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Šrobárova 2, 041 54 Košice, jan.elecko@upjs.sk*

Pojmom iminosacharidy sa označujú polyhydroxylované alkaloidy, štruktúrne analógy „normálnych“ sacharidov, ktoré namiesto endocyklického kyslíkového atómu obsahujú dusík. Táto skupina látok zahŕňa okrem monocyklických aj bicyklické templáty, kde dusíkový atóm prislúcha obom cyklom [1]. Iminosacharidy predstavujú atraktívnu skupinu sacharidových mimetík v úlohe inhibítorov glykozidáz. Vďaka tejto vlastnosti nachádzajú uplatnenie pri liečbe cukrovky, ako pritirakovinové a proti-HIV liečivá [2]. Značný potenciál a špecificita týchto inhibítorov spočíva v ich schopnosti imitovať tranzitný stav prírodných substrátov. Predpokladá sa, že pre viazanie do aktívneho miesta enzýmu sú dôležité faktory konformačné (tvar) aj elektrostatické (náboj) [3].

Ako východisková látka bola v našich syntézach použitá D-glukóza, predstavujúca vhodný chirálny prekurzor. Na vytvorenie nového stereogénneho centra na uhlíku C-5 nesúceho dusíkový atóm bol využitý aza-Claisenov prešmyk.



Obr. 1 Retrosyntetická stratégia

Predkladaná práca vzniká za podpory Vedeckej grantovej agentúry (1/0433/11) Ministerstva školstva Slovenskej republiky a univerzitného grantu (VVGS UPJŠ 43/12-13).

[1] Horne, G.; Wilson, F. X.; Tinsley, J.; Williams, D. H.; Storer, R. *Drug Discovery Today* **2011**, *16*, 107-118.

[2] Afarinkia, K.; Bahar, A. *Tetrahedron: Asymmetry* **2005**, *16*, 1239-1287.

[3] Heightman, T. D.; Vasella, A. T. *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, *38*, 750-770.

3Po13
ORGANOKATALYTICKÁ MICHAELOVA ADÍCIA V SYNTÉZE OSELTAMIVIRU A JEHO ANALÓGOV

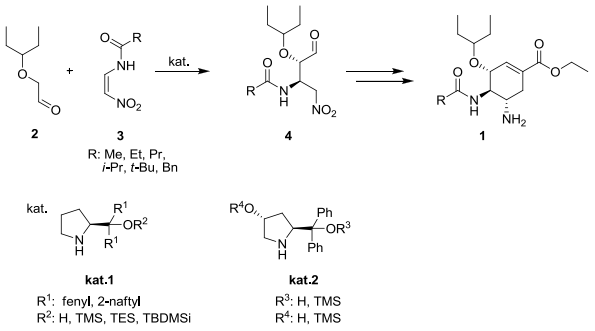
Viktória Hajzer[a], Július Durmis[a], Radovan Šebesta[b]

[a]*Synkola, s.r.o., Mlynská dolina CH-2, 842 15, Bratislava,* viktoria.hajzer@synkola.sk
[b] *Katedra organickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzity Komenského, Mlynská dolina CH-2, 842 15, Bratislava*

Oseltamivir fosfát je aktívnou zložkou liečiva Tamiflu®, ktoré sa používa ako antivirotikum pri liečení rôznych druhov chrípkových ochorení, ktoré sú vo svete veľmi rozšírené. Firma Hoffman-La Roche pôvodne vyrábala túto aktívnu zložku 13 stupňovou syntézou z kyseliny šikimovej [1]. Za poslednú dekádu sa viacero syntetických skupín venovalo výskumu prípravy tejto zlúčeniny [1][2].

Naša skupina rozvinula trojstupňovú syntézu prípravy oseltamiviru **1** (R=Me) bez použitia tiolov. Kľúčovým krokom syntézy je oganokatalytická Michaelova adícia katalyzovaná Jørgensen-Hayashiho katalyzátorom (**kat.1**, R^1=Ph, R^2=TMS). V posledných rokoch sme sústredili pozornosť na optimalizáciu reakčných podmienok Michaelovej adície [2] (teplota, reakčný čas, aditívum, molárne pomery komponentov) za účelom zvýšenia diastereoselektivity a enantioselektivity reakcie.

V novej fáze sme nadviazali na výskum optimalizácie Michaelovej reakcie rovnako so zameraním na selektivitu. Pozornosť sme upriamili na prípravu a testovanie rôznych organokatalyzátorov (**kat.1**, **kat.2**) v nami zoptimalizovaných podmienkach Michaelovej adície. Ovplyvniť selektivitu reakcie sme sa pokúsili zavedením objemných substituentov R^1 a R^2 (**kat.1**) a substitúciou v polohe 4- (**kat.2**). S rastúcou stérickou náročnosťou substituentov (**kat.1**) rástla aj diastereoselektivita reakcie. Ďalším možným spôsobom ovplyvnenia selektivity Michaelovej adície je štruktúrna obmena východiskových derivátov, čím pripravíme analógy oseltamiviru. Obmenou pôvodného acetylnitroolefínu **3** sme pripravili odpovedajúce Michaelové adukty (**4**) s alifatickým a benzylovým substituentom R na amide, bez výrazneho ovplyvnenia selektivity reakcie.



[1] Abrecht, S.; Federspiel, M. C.; Estermann, H.; Fischer, R.; Karpf, M.; Mair, H.-J.; Oberhauser, T.; Rimmler, G.; Trussardi, R.; Zutter, U. *Chimia* **2007**, *61*, 93.
[2] Magano, J. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 4398-4438., Zhu, S.; Yu, S.; Wang, Y.; Ma D. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2010**, *49*, 4656–4660.
[3] Hajzer, V.; Latika, A.; Durmis, J.; Šebesta, R. *Helv. Chim. Acta*, **2012**, *95*, 2421-2428.

3Po14
VISUALIZATION OF FLUORESCENT-LABELED CARBON-BASED NANOPARTICLES IN A POLYMER MATRIX

Markéta Ilčíková[1], Martin Danko[1], Jaroslav Mosnáček[1], Zdenko Špitálský[1], Mikhail Doroshenko[2], Kaloian Koynov[2]

[1]*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravksá cesta 9, 845 41, Bratislava, Slovensko, marketa.ilcikova@savba.sk*
[2] *Max Planck Institute for Polymer Research, Ackermannweg 10, 55128, Mainz, Germany*

The preparation carbon-based composites with good mechanical and electrical properties requires well dispersed and distributed filler in the polymer matrix. The graphene-like surfaces however tend to aglomerate due to strong π-π interacitons. To prevent it, the surface modification is needed. In this study the monitoring of fluorescent-labeled carbon-based nanoparticles using laser scanning confocal microscopy (LSCM) is presented.

Graphene oxide (GO) and two types of multiwalled carbon nanotubes of different size (MWCNT) were visualized in styrene-*b*-isoprene-*b*-isoprene matrix (SIS; Kraton D1165, 30 % PS; KRATON, USA). Both GO and MWCNT nanotubes were covalently modified. First hydroxyl groups (OH) were introduced on the surface of GO and MWCNT according to Brodie method and diazotation, respectively. The OH groups served for bonding of ATRP initiator and then the styrene was polymerized using ATRP.

The polymer chain-ends were finaly coupled with fluorescent benzothioxanthene imide derivative containing nitroxyl group.

LSCM enabled imaging in both fluorescent and reflection mode. The reflective images confirmed better dispersion of modified GO since the original particles (50 μm) were crushed during modification to 1-20 μm. Thinner MWCNT (*d*~9 nm) appeared as shinning dots while the bigger MWCNT (*d*~60-100 nm) were observable in both reflective and fluorescent mode as individual worm-like objects.

Acknowledgement: The authors thank for the financial support of the NMT-ERANET „APGRAPHEL", Slovak Research and Development Agency through Grant APVV 0109-10, and Centre of Excellence SAS for Functionalized Multiphase Materials (FUN-MAT).

3Po15
MODIFIKÁCIA VLASTNOSTÍ KOMPOZITOV NA BÁZE POLYAMIDU GAMA ŽIARENÍM

Ivica Janigová[1], Mária Porubská[2], Dragan Babič[3], Klaudia Jomová[2], Ivan Chodák[1], Miroslav Šlouf[4]

[1]*Ústav polymérov SAV,Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovenská republika, upoljani@savba.sk*
[2]*Katedra chémie, Fakulta prírodných vied, Univerzita Konštantína Filozofa v Nitre, Tr. A. Hlinku 1, 949 01 Nitra, Slovenská republika*
[3]*Institute of nuclear sciences „Vinca", PO Box 522, 11001 Belgrade, Serbia*
[4]*Oddělení morfologie a reologie polymerních materiálů, Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 162 06 Praha 6, Česká republika*

Polyamidy (PA) patria medzi bežne používané termoplastické materiály, ktorých vlastnosti je možné ovplyvniť napríklad prítomnosťou plniva. Modifikácia PA chemickou cestou v tavenine sieťovaním iniciovaným termickým rozkladom peroxidov nie je možné, vzhľadom na vysokú teplotu topenia PA [1]. Alternatívny spôsob iniciácie sieťovania je pôsobenie žiarenia [2].

V predkladanej práci sme sa zaoberali štúdiom vplyvu gama žiarenia na morfológiu, termické a mechanické vlastnosti PA6 plneného 30 hm. % sklenných vlákien. Porovnávali sme vplyv atmosféry počas ožarovania (vzduch, argón). Štúdium morfológie vzoriek ukázalo určité zlepšenie adhézie matrice na povrch plniva po ožiarení v inertnej atmosfére, čo je v súlade s výsledkami tvorby gélu, kde sme gél zaznamenali iba vo vzorkách ožarovaných v argóne. Predpokladáme, že dôvodom je nízka rýchlosť ožarovania (9,5 kGy/hod). Počas ožarovania vo vzduchu môže dochádzať k oxidácii vznikajúcich makroradikálov, čo môže viesť k oxidačnému štiepeniu polymérnych reťazcov.

Termické vlastnosti vzoriek boli ovplyvnené počas ožarovania superpozíciou viacerých procesov. Predpokladamé, že pri nižších dávkach žiarenia dochádza k uvoľňovaniu fyzikálnych väzieb, fragmentácii makroradikálov a nukleácii. Pri vyšších dávkach žiarenia k oxidácii (vzduch), degradácii a sieťovaniu (argón), čo viedlo k výraznejšiemu poklesu kryštalického podielu s rastúcou dávkou žiarenia pre vzorky ožarované v inetre.

Podobne mechanické vlastnosti zaznamenali výrazný pokles v hodnotách Youngovho modulu a napätia pri pretrhnutí len pre vzorky ožarované v inerte.

Táto práca vznikla s podporou Vedeckej grantovej agentúry MŠ SR a SAV Grant VEGA No. 2/0147/12 a Agentúry pre podporu výskumu a vývoja Grant No. APVV-51-010405.

[1] Arkema technical Information: 1. peroxide Selection Based on Half-Life, http://www.arkema.com/sites/group/en/home.page , (2006)
[2] Susan Dadbin, Masoud Frounchi, Davood Goudarzi, Polym. Deg. and Stab., 89, 436-441 (2005)

3Po16
VLIV *N*-ARYLSULFONYL-1,2-DIFENYLETYLEN-1,2-DIAMINOVÉHO LIGANDU V NOYORIHO TYPU KATALYZÁTORU NA PRŮBĚH ASYMETRICKÉ TRANSFER HYDROGENACE IMINŮ

Jakub Januščák[1], Ondřej Matuška[1], Marek Kuzma[2], Petr Kačer[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Ústav organické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, jakub.januscak@vscht.cz*
[2]*Mikrobiologický ústav AV ČR, v.v.i., Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4 – Krč*

Metody asymetrické syntézy jsou v dnešní době velice intenzivně zkoumány. Na rozdíl od klasických syntetických postupů vzniká produkt obohacený o žádaný enantiomer. To značně usnadňuje přípravu vysoce opticky čistých produktů, což je důležité zvláště při přípravě chirálních léčiv, agrochemikálií či jiných chemických specialit.

Jedním z důležitých postupů v asymetrické syntéze představuje asymetrická hydrogenace (ATH). Noyoriho typ katalyzátoru [Ru(II)Cl(η^6-aren)(*N*-arylsulfonyl-1,2-difenylethylen-1,2-diamin)] se vyznačuje velmi vysokou enantioselektivitou při ATH ketonů a iminů na příslušné chirální alkoholy resp. aminy. Nejběžněji používaným katalyzátorem Noyoriho typu je [Ru(II)Cl(*p*-cymen)(*N*-tosyl-1,2-difenylethylen-1,2-diamin)].

Při ATH iminů dochází k záchytu protonovaného substrátu k molekule katalyzátoru pomocí vodíkového můstku mezi kyslíkem sulfonylové skupiny v *N*-arylsulfonyl-1,2-difenylethylen-1,2-diaminovém ligandu a dusíkem substrátu[1], následně pak dochází k přenosu vodíku. Tento fragment katalyzátoru tedy může mít zásadní vliv na průběh reakce. Tématem tohoto příspěvku je systematické prozkoumání vlivu různých *N*-arylsulfonyl-1,2-difenylethylen-1,2-diaminů na aktivitu a enantioselektivitu katalyzátoru při ATH cyklických iminů z třídy dihydroisochinolinů. Vedle publikovaných ligandů (např. mesityl-, tolyl-, naftylsulfonyldifenyletylendiamin), byly testovány i nově navržené struktury.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2013) a z grantové agentury české republiky (grant GACR 104/09/1497 a P106/12/1276)

[1] Kuzma, M.; Václavík, J.; Novák, P.; Přech, J.; Januščák, J.; Červený, J.; Pecháček, J.; Šot, P.; Vilhanová, B.; Matoušek, V.; Goncharova, I. I.; Urbanová, M.; Kačer, P.: Dalton Trans. (2013) 42, 5174.

3Po17
FLUORESCENČNÍ DERIVÁTY TRILOBOLIDU A JEJICH BIOLOGICKÝ PROFIL

Michal Jurášek[1], Silvie Rimpelová[1], Eva Kmoníčková[2,3], Pavel Drašar[1*] and Tomáš Ruml[1]

[1]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, CZ-16628 Praha, Česká republika
[2]Ústav experimentální medicíny AV ČR, v.v.i., CZ-14220 Praha, Česká republika
[3]Univerzita Karlova, Fakulta medicíny, CZ-30605 Plzeň, Česká republika

Fluorescenčně značené přírodní látky ve výzkumu molekulárně biologických interakcí v buňkách získaly velkou oblibu. Řada informací jako lokalizace, orientace či asociace s jinými molekulami může být získána při mikroskopii fluorescenčně značených látek na živých buňkách.

Trilobolid, strukturně příbuzný thapsigarginu, je sesqviterpenový lakton isolovaný z timoje trojlaločného (*Laser trilobum,* L. Borkh). Z medicinálního pohledu je velmi potentním imunostimulantem; je významným „spouštěčem“ sekrece interferonu γ a oxidu dusnatého v peritoneálních a periferálních mononukleárních krevních buňkách. Stimulační potenciál je zřejmě závislý na aktivaci MAP kináz p38, ERK 1/2 a transkripčním faktoru NF-κB [1]. Inhibiční aktivita trilobolidu na sarco/endoplasmatickou kalciovou ATPasu byla rovněž potvrzena [2].

Byly připraveny a studovány fluorescenčně značené deriváty trilobolidu se zeleně emitujícím BODIPY (bor dipyrromethan), navzájem propojené můstky s různými délkami. Mikroskopie na živých buňkách poskytla zřejmý důkaz o lokalizaci některých derivátů v endoplazmatickém retikulu rakovinných buněk prostaty. Metabolická aktivita a produkce NO na buňkách vystavených těmto derivátům byly rovněž testovány.

Práce byla podpořena projekty MŠMT ČR MSM6046137305, a GA ČR 304/10/1951 a P503/11/0616.

[1] Kmoníčková E. a kol.: Fitoterapia, (2010)
[2] Skytte D. M. a kol.: *Bioorgan. Med. Chem.,* (2010)

3Po18
SYNTÉZA A PŘESMYK SUBSTITUOVANÝCH *S*-(1-BENZOFURAN-2(3*H*)-ON-3-YL) ISOTHIOURONIUM-BROMIDŮ

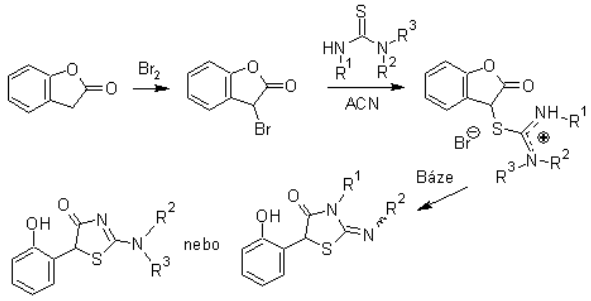
Richard Kammel, Jiří Hanusek

Ústav organické chemie a technologie, Univerzita Pardubice, Studentská 57, 532 10 Pardubice, Česká republika

Na ústavu organické chemie a technologie je dlouhodobě řešena problematika přesmyku isothiouroniových solí odvozených od halogenoctových kyselin, γ-laktamů[1] a γ-laktonů[2] poskytujících deriváty 1,3-thiazolidin-2,4-dionu. Tato práce se zabývá syntézou různě substituovaných *S*-(1-benzofuran-2(3*H*)-on-3-yl) isothiuronium bromidů a jejich následným přesmykem na substituované 5-(2-hydroxyfenyl)-2-imino-1,3-thiazolidin-4-ony.

Příprava isothiouroniových solí vychází z cyklického laktonu 2-kumaranonu, který se bromuje do polohy 3, kde je potřeba dobré odstupující skupiny. 3-Brom-2-kumaranon dále reaguje s různě substituovanými thiomočovinami, dochází k nukleofilní substituci atomu bromu za

atom síry a vzniká příslušná isothiouroniová sůl. Vzniklá sůl se v bazickém prostředí přesmykuje na substituovaný thiazolidinonový nebo thiazolonový cyklus.



Obr. 1 Schéma

U tohoto přesmyku se uplatňuje acidobazická katalýza za velmi mírných podmínek. Přesmyk probíhá i při fyziologickém pH, což může mít potenciální význam při využití těchto látek jako proléčiv. Rovněž byla studována kinetika a podrobný mechanismus tohoto přesmyku za pomocí UV-VIS spektroskopie ve vodných roztocích pufrů.

[1] Sedlák M., Hejtmánková L., Hanusek J., Macháček V.: *J. Heterocycl. Chem*. **2002**, *39*, 1105-1107.

[2] Váňa J., Hanusek J., Růžička A., Sedlák M.: *J. Heterocycl. Chem.* **2009**, *46*, 635-639.

[3] Váňa J., Sedlák M., Kammel R., Roithová J., Škríba A., Jašík J.: *J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 4456-4462.

3Po19

SYNTHESIS, BIOLOGICAL ASSESSMENT AND MOLECULAR MODELING OF NOVEL TACRINE-7-METHOXYTACRINE HETERODIMERS FOR ALZHEIMER DISEASE TREATMENT

Jan Korabecny[1,2], Slavka Hamulakova[3], Ladislav Janovec[3], Zuzana Gazova[4], Katarina Siposova[4], Lukas Gala[5], Marian Valko[5], Kamil Kuca[2]

[1] *Department of Toxicology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defence, Trebesska 1575, 500 0, Hradec Kralove, Czech Republic; korabecny.jan@gmail.com*

[2] *University Hospital Hradec Kralove, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*

[3] *Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P.J. Safarik University, Moyzesova 11, 041 67 Kosice, Slovak Republic*

[4] *Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Watsonova 47, 040 01 Kosice, Slovak Republic*

[5] *Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak Technical University, SK-812 37 Bratislava, Slovak Republic*

The first acetylcholinesterase (AChE) inhibitor approved for Alzheimer's disease treatment by the US Food and Drug Administration was tacrine, licensed in 1993. However, its severe side-effects manifested mainly by hepatotoxicity and cholinergic effects upon the gastrointestinal tract limited its usage. Recent contributions to the development of tacrine related agents disclosed 7-methoxytacrine to be less toxic, indeed, with equal pharmacological profile. In the development process of highly potent tacrine analogues, heterodimers bearing tacrine and 7-methoxytacrine congeners in single molecule were synthesized, computationally designed and tested for their ability to inhibit AChE and butyrylcholinesterase (BChE). Moreover, these hybrids proved inhibition ability towards β-amyloid (Aβ) aggregation in micromolar range, capability of Aβ depolymerization, MAO-A/B inhibition properties and Cu^{2+} chelating ability. Together with low acute toxicity, these findings underline two analogues (**19** and **23**) as very interesting candidates for further studies in connection with their possible use in the treatment of AD.

This study was supported by the specific research (SV/FVZ201201), by the Grant Agency of the Czech Republic (No. P303/11/1907), by Post-doctoral project (No. CZ.1.07/2.3.00/30.0044), by Long Term Development plan – 1011, by VEGA 0079, CEX of SAS Nanofluid, APVV 0171-10 and by project 26220220005 in the framework of the Structural Funds of European Union.

3Po20
WARFARÍN – JEHO SYNTÉZA A VLASTNOSTI

Eva Milatová[1], Viktor Milata[2], Daniel Végh[2]

[1] I.Interná klinika SZÚ, Limbová 5, 833 05 Bratislava
[2] Oddelenie organickej chémie, Ústav organickej chémie, katalýzy a petrochémie FCHPT STU, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, rosamichal@zoznam.sk, viktor.milata@stuba.sk

Táto práca je venovaná prof. RNDr. Jozefovi Čižmárikovi, PhD. pri príležitosti jeho životného jubilea.

Príspevok sa zaoberá niektorými aspektami histórie warfarínu a jeho použitia spočiatku ako rodenticídu a neskôr ako antikoagulancia. Sú popísané jeho základné fyzikálno-chemické vlastnosti a schematicky rozobrané možnosti prípravy selektívnou i neselektívnou syntézou z derivátov kumarínu. Bude uvedený tabuľkový prehľad syntéz a ich výsledkov s literárnymi odkazmi a záver článku tvorí zhodnotenie perspektív tohto liečiva s porovnaním s alternatívnymi antikoagulanciami a zhodnotené sú ich výhody, nevýhody a perspektívy.

Samotný warfarín bol zavedený do klinickej praxe v roku 1955, aj keď jeho objav sa pripisuje Stahmannovi a kol. v roku 1947. Meno WARFARIN vzniklo z prvých písmen **W**isconsin **A**lumni **R**esearch **F**oundation. Koncovka **–ARIN** naznačuje, že sa jedná o zlúčeninu patriacu medzi kum**arín**y. Je všeobecne známe, že bol vynájdený ako jed na potkany - rodenticíd, ale vďaka rôznym náhodám sa zistilo, že jeho protizrážanlivý efekt možno využiť v medicíne pri farmakoterapii. Dokonca aj americký prezident Dwight D. Eisenhower bol jedným z prvých pacientov liečených warfarínom. Dnes je warfarin celosvetovo najrozšírenejšie používané antikoagulačné liečivo. Býva predpisovaný pacientom trpiacim žilovými trombózami a fibriláciami predsiení. Aj keď je toto liečivo využívané v medicíne už viac ako 50 rokov, stále sú s ním spojené určité komplikácie. Tieto sú spôsobené tým, že toto liečivo vykazuje širokú interindividuálnu variabilitu v dávke, má úzke terapeutické rozmedzie a vyskytujú sa rôzne interakcie s inými liekmi alebo potravinami.

This contribution is the result of the project: Research Center for Industrial Synthesis of Drugs, ITMS 26240220061, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

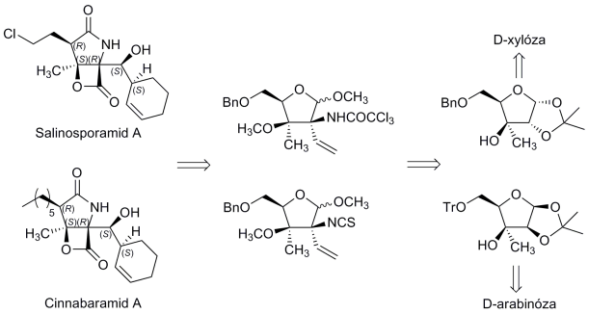
3Po21
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA PREKURZOROV SALINOSPORAMIDU A A CINNABARAMIDU A Z D-XYLÓZY A D-ARABINÓZY

Margaréta Kováčová, Miroslava Martinková, Jozef Gonda

Univerzita P. J. Šafárika v Košiciach, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Šrobárova 2, 041 54 Košice, margareta.kovacova1@student.upjs.sk

Objavenie proteazómu v 80-tych rokoch minulého storočia dalo impulz k skúmaniu a objavovaniu špecifických inhibítorov 20S proteazómu. Prvým objaveným nepeptidickým inhibítorom patriacim do skupiny β-laktónov bol laktacystín. Neskôr boli z morských aktinomycét *Salinospora tropica* a suchozemských streptomycét *S. cinnabarinus* izolavané salinoporamid A a cinnabaramid A [1, 2]. Vo svojej štruktúre majú prítomný γ-laktám-β-laktónový bicyklický skelet. Inhibítory proteazómu nachádzajú potenciálnu aplikáciu pri ochrane rastlín, proti parazitom, pri liečbe zápalov, autoimunitných ochorení a rakoviny, kde inhibujú rast rakovinových buniek [3].

Ako východiskové látky boli pre našu syntézu zvolené D-xylóza a D-arabinóza. Prvým kľúčovým krokom v syntéze je zavedenie metylovej skupiny na uhlík C-3 u vhodne chránenej D-xylózy a D-arabinózy. Druhým krokom je vybudovanie nového stereogenného centra na uhlíku C-2 nesúceho dusíkový atóm s využitím aza-Claisenovho a Overmanovho prešmyku (Obr.1).



Obr. 1 Retrosyntetická stratégia

Predkladaná práca vzniká za podpory Vedeckej grantovej agentúry (1/0568/12 a 1/0433/11) Ministerstva školstva Slovenskej republiky a univerzitného grantu (VVGS UPJŠ 43/12-13).

[1] de Bettignies, G.; Coux, O. *Biochimie* **2010**, *92*, 1530-1545
[2] Rachid, S.; et al. *ChemBioChem* **2011**, *12*, 922-931
[3] Potts, B. C.; Lam, K. S. *Mar. Drugs* **2010**, *8*, 835-880

3Po22
ÚČINNOST POLYMERNĚ VÁZANÝCH STABILIZÁTORŮ V POLYSTYRE–NOVÝCH PLASTECH

Jana Kovářová[1], Jiří Podešva[1]

[1]*Ústav makromolekulární chemie, Akademie věd České republiky, v.v.i., Heyrovského nám. 2, 16206 Praha 6, Česká republika, kovarova@imc.cas.cz*

Přítomnost dvojných vazeb v molekule houževnatého polystyrenu nebo lineárního termoplastického butadien-styrenového kopolymeru činí tyto polymery náchylné k oxidativní degradaci. Zaměřili jsme se proto na přímé navázání stabilizačních skupin typu stericky stíněného fenolu a světelného stabilizátoru HALS na dvojné vazby nenasycených polymerů. Použili jsme stejný postup, jako v případě dříve prováděné radikálové adice zmíněných stabilizačních skupin na visící dvojné vazby kapalného polybutadienu [1,2,3].

K charakterizaci termooxidační stability takto nově připravených polymerních stabilizátorů a pro hodnocení jejich stabilizační účinnosti v polystyrenových plastech (HIPS, Calprene) byly použity metody termické analýzy, TGA a DSC ve vzduchové atmosféře. Byla pozorována postupně se zvyšující účinnost syntetizovaných polymerně vázaných fenolických antioxidantů s jejich zvyšující se koncentrací v polymeru HIPS a v blokovém butadien-styrenovém kopolymeru Calprene. U stabilizátorů typu HALS v HIPS byla sledována i světelná stabilita na přístroji Xenon Weather-Ometr ATLAS Ci 3000 za použití spektrálního měření remisních křivek v oblasti 360 až 800 nm. Vyhodnocována byla barevná odchylka (ΔE) a změny indexu žlutosti při dávce ozáření 280 kJ/m^2 v jednom cyklu.

Autoři děkují Grantové agentuře MPO, projekt FR-TI2/338 za finanční podporu.

[1] J.Podešva, J.Kovářová: J. Appl. Polym. Sci., *87*, 885 (2003).

[2] J.Podešva, J.Kovářová, J. Spěváček,: Czech Patent 296584 (2006).

[3] J.Podešva, J.Kovářová, J. Spěváček,: Czech Patent 299104 (2008).

3Po23
SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH FENOLICKÝCH KARBAMÁTŮ

Martin Krátký[1], Jarmila Vinšová[1], Jiřina Stolaříková[2]

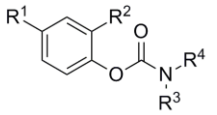
[1]*Katedra anorganické a organické chemie, Farmaceutická fakulta University Karlovy, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, martin.kratky@faf.cuni.cz*
[2]*Laboratoř pro diagnostiku mykobakterií a tuberkulózu, Zdravotní ústav se sídlem v Ostravě, Partyzánské náměstí 7, 702 00 Ostrava*

Nepříznivý nárůst rezistence bakterií k antimikrobním léčivům se odráží v potřebě nových aktivních molekul, optimálně s inovativním mechanismem účinku bez zkřížené rezistence. U *Mycobacterium tuberculosis*, původce tuberkulózy, byly kromě multilékově a extensivně rezistentních kmenů popsány i tzv. totálně rezistentní kmeny, necitlivé vůči všem klinicky užívaným antituberkulotikům [1].

Jedním z přístupů je modifikace známých struktur. Salicylanilidové deriváty vykázaly široké antimikrobiální spektrum (*M. tuberculosis* včetně rezistentních kmenů, atypické mykobakterie, Grampozitivní bakterie, vláknité houby) [2]. Jejich *N*-alkyl karbamáty představují vysoce antimykobakteriálně účinné molekuly se sníženou cytotoxicitou [3]. Fenoly patří mezi nespecifická antiseptika. Proto jsme při hledání účinných molekul syntetizovali nové salicylanilidové a fenolické *N*,*N*-disubstituované a *N*-monosubstituované karbamáty (obr. 1).

Příprava *N*,*N*-disubstituovaných karbamátů spočívala v acylaci triethylammoniových solí generovaných *in situ* příslušnými karbamoyl chloridy. Reakce probíhala většinou v dichlormethanu, použití acetonitrilu umožnilo zkrátit reakčního času beze změny výtěžku. V případě syntézy vycházející z isokyanátů jsme mírně modifikovali postup [3]. Vedlejší reakcí zejména při syntéze *N*-fenyl- a *N*-(adamantan-1-yl)karbamátů byl vznik příslušné močoviny z isokyanátu. Proto byly vyzkoušeny různé reakční podmínky (typ baze, rozpouštědla, stupeň vysušení, reakční čas, teplota).

Připravené karbamáty podstoupily biologické hodnocení vůči *M. tuberculosis* a atypickým mykobakteriím; výsledky budou presentovány. Karbamáty odvozené od fenolů vykázaly obecně nižší antimykobakteriální aktivitu než deriváty halogenovaných salicylanilidů.



R^1 = H, Cl
R^2 = H, fenylkarbamoyl, (4-halogen/trifluormethylfenyl)karbamoyl
R^3 = H, CH_3, fenyl
R^4 = CH_3, fenyl, cyklohexyl, benzyl, fenylethyl, adamantan-1-yl

Obr. 1 Obecná struktura připravených karbamátů

Tato publikace je výsledkem implementace projektu: „Podpora vytváření, rozvoje a mobility kvalitních výzkumně-vývojových týmů na Univerzitě Karlově“, registrační číslo CZ.1.07/2.3.00/30.0022, podporovaným operačním programem Vzdělávání pro konkurenceschopnost (OP VK) a financovaným z Evropského sociálního fondu a státního rozpočtu České republiky.
Práce byla dále podpořena grantem IGA NT 13346 (2012).

[1] Zarir F. Udwadia: Respirology, (2012)
[2] Martin Krátký a Jarmila Vinšová: Curr. Pharm. Des., (2011)
[3] Juana Monreal Férriz et al.: Bioorg. Med. Chem., (2010)

3Po24
PŘÍPRAVA A IN VITRO STUDIE CHELATUJÍCÍCH MIKROČÁSTIC PRO TERAPII WILSONOVY CHOROBY

Kučka J.[1], Hrubý M.[1], Škodová M.[1], Vetrík M.[1], Mattová J.[2], Poučková P.[2], Zadinová M.[2]

[1]*Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v. v. i.*
[2]*Ústav biofyziky a informatiky, 1. LF UK v Praze*

Wilsonova nemoc je geneticky podmíněné onemocnění metabolismu mědi, které vede ke kumulaci mědi v organismu. Po dosažení toxických koncentrací v mozku a játrech neléčený pacient umírá. Dosavadní léčba nízkomolekulárními léčivy je však provázena silnými nežádoucími efekty.

V této studii jsme se zaměřili na použití nerozpustných zesítěných makroporézních mikročástic s ligandy selektivně chelatujícími měď. Tyto mikročástice použité jako doplněk stravy mohou představovat účinnou terapii této smrtelné nemoci bez vedlejších účinků pouhým snížením obsahu biologicky dostupné mědi v potravě.

Připravené mikročástice obsahovaly triethylen–tetraamin, dipikolylamin a 8-hydroxychinolin jako selektivní chelátory mědi. Jako polymerní matrice byl zvolen poly(glycidyl methakrylát-co-ethylendimethakrylát). Prostřednictvím pufrovaných vodných roztoků a koktejlu aminokyselin s různým pH bylo nasimulováno prostředí žaludku a střeva, kde se následně stanovil stupeň absorpce a desorpce mědi pomocí UV-VIS spektrometrie. Schopnost vazby mědi v nízkých koncentracích byla prokázána i pomocí radioaktivní mědi ^{64}Cu.

Závěr: Bylo zjištěno, že polymer s navázanými ligandy je schopen téměř kompletně vychytávat měď ze simulovaného prostředí žaludku i střeva. Vazba mědi na částice byla zcela stabilní v simulovaném obsahu žaludku a dostatečná i v simulovaném prostředí střeva.

Studie in vitro makroporézních mikročástic s příslušnými ligandy prokázaly požadované vlastnosti a částice byly postoupeny pro studie in vivo.

Práce vznikla za podpory grantu č. P304/12/0950 Grantové agentury České republiky.

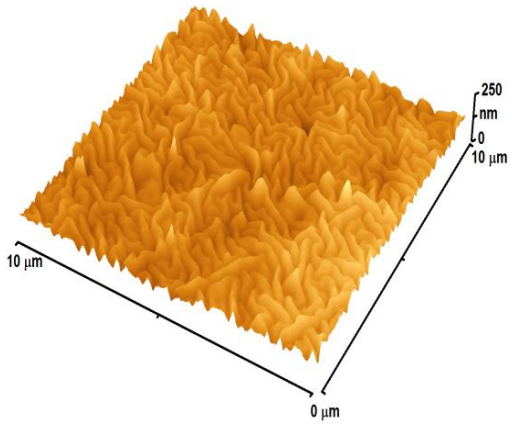
3Po25
POVRCHOVÁ MORFOLOGIE PLAZMATICKY MODIFIKOVANÉHO A NÁSLEDNĚ TEPELNĚ NAMÁHANÉHO PLLA

Ondřej Kvítek[1], Lenka Buřičová[1], Petr Slepička[1], Václav Švorčík[1]

[1]*Ústav inženýrství pevných látek, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28 Praha, kviteko@vscht.cz*

Polymerní materiály jsou již dlouhou dobu využívány v širokém spektru aplikací díky své cenové dostupnosti a široké škále výhodných vlastností, jež lze podle potřeby ovlivňovat např. změnou chemického složení nebo molekulové hmotnosti polymeru. Řada aplikací polymerů v oblastech jako je potravinářský a automobilový průmysl, medicína, farmacie a stavebnictví využívají zejména jejich vhodné objemové vlastnosti [1]. Některé specifické aplikace, mezi něž se řadí např. tkáňové inženýrství nebo specifické aplikace v elektronice a senzorické technice, však vyžadují možnost ovlivňování vlastností jejich povrchu. Struktura polymerního substrátu může být navíc dále použita pro tvorbu kompozitních materiálů využívajících s výhodou jednodušších metod modifikace morfologie povrchu polymeru [2].

V této práci byly studovány nanostrukturované povrchy poly(L-mléčné) kyseliny připravené metodou plazmatické modifikace v Ar^+ plazmatu. Vzorky byly následně teplotně namáhány a byly vyšetřovány jejich optické vlastnosti a morfologie povrchu.



Obr. 1 AFM snímek modifikovaného povrchu PLLA

Bylo zjištěno, že tepelné namáhání při 60°C plazmaticky modifikovaného povrchu poly(L-mléčné) kyseliny vede k tvorbě nano–strukturovaného povrchu. Lamelární struktura vystupující na povrchu vzorků se objevuje pouze u vzorků, jež byly plazmaticky modifikovány a následně namáhány tepelně a zřejmě souvisí s krystalickým uspořádáním polymeru. Povrchová struktura studovaná pomocí metody AFM vykazuje značnou závislost periodicity a amplitudy lamelární struktury na podmínkách procesu modifikace.

Tato práce vznikla za finanční podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.21/2013) a GAČR z projektu P108/12/G108.

[1] C.M. Chan, T.M. Ko, H. Hiraoka: Surf. Sci. Rep. 24, 1-54 (1996)
[2] P. Slepička, T. Fidler, A. Vasina, V. Švorčík: Mater. Lett. 79, 4-6 (2012)

3Po26
2,2-DIMETYL-5-((2-ETYLHYDRAZINYL)METYLEN)-1,3-DIOXANE-4,6-DION: PRÍPRAVA A ŠTRUKTÚRA

Ján Lokaj[1], Ján Moncoľ[1], Viktor Milata and Denisa Tarabová

[1]*Institute of Inorganic Chemistry, Technology and Materials, FCHPT, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-81237 Bratislava, Slovakia,*
2 Innstitue of organic chemistry, FCHPT, Slovak University of Technology in Bratislava, SK-81237 Bratislava, Slovakia,

Enhydrazíny zlúčeniny predstavujú širokú skupinu zlúčenín, ktorých volný elektrónový pár na atóme dusíka je v konjugácii s pí-elektrónmi dvojitej väzby, čím vznikne vysoko reaktívne zoskupenie vhodné pre prípravu pyrazolov. Pripravujú sa reakciou substituovaných hydrazínov s enolétermi. Zatial čo alkyhydrazíny reagujú zvyčajne cez atóm dusíka nesúceho alkylovú skupinu, podarilo sa nám pripravit, izolovat a určiť kryštálovú štruktúru produktu nukleofilnej vinylovej substitúcie cez primárnu aminoskupinu.

Pripravená zlúčenina 2,2-dimetyl-5-((2-etylhydrazinyl)metylen)-1,3-dioxane-4,6-dione kryštalizuje v monoklinickéj sústave v priestorovej grupe *C*2/c (a = 27,9436(6) Å, b = 10,1683(3) Å, c = 14,1604(3) Å, β = 100,3349(2)˚, V = 3958,25(17) Å^3. Výsledné parametre monokryštálovej štruktúrnej analýzy sú nasledovné R_1 = 0,0430, wR_2 = 0,1225, S = 1,037. Nezávisla časť základnej bunky obsahuje dve kryštalograficky nezávislé molekuly 2,2-dimetyl-5-((2-etylhydrazinyl)metylen)-1,3-dioxane-4,6-dionu. Molekuly sú pospajané cez N-H...O vodíkové väzby do jednorozmerných reťazcov, ktoré sú prostredníctvom slabých vodíkových väzieb C-H...N pospájané do pásových dvojreťazcov podobných koľajniciam.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency (APVV-0339-10 and APVV-0038-11) and Scientific Grant Agency of the Ministry of Education of Slovak Republic and the Slovak Academy of Sciences (Project VEGA 1/0660/11).

[1] A.M. Beatty: Coord. Chem. Rev. 246 (2003) 131.
[2] J. Moncol, M. Múdra, P. Lönnecke, M. Hewitt, M. Valko, H. Morris, J. Švorec, M. Melnik, M. Mazúr, M. Koman: Inorg. Chim. Acta 360 (2007) 3213.
[3] V. Kuchtanín, J. Moncol, J. Mrozinski, B. Kalinska, Z. Padělková, J. Švorec, P. Segľa, M. Melnik: Polyhedron 50 (2013) 546.

3Po27
SYNTÉZA HAPTENŮ ODVOZENÝCH OD POHLAVNÍCH HORMONŮ

Ondřej Longin[1], Ivan Černý[2], Pavel Drašar[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28 Praha 6, longino@vscht.cz*
[2]*Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., Flemingovo náměstí. 2, 166 10 Praha 6*

Pohlavní hormony jsou látky steroidní povahy, jež ovlivňují metabolismus, rozvoj sekundárních pohlavních znaků a reprodukci obratlovců. Biologická aktivita pohlavních hormonů a jejich derivátů je natolik významná, že se uplatňují jako léčiva, antikoncepce či jsou v případě androgenů zneužívány pro svůj anabolický účinek.

Screeningové stanovení přítomnosti pohlavních hormonů, jejich metabolitů nebo derivátů v tělních tekutinách pomocí imunochemických metod umožňuje diagnostikovat poruchy

metabolismu, indikovat změny ve vývoji a růstu, či prokázat zneužití anabolických steroidů.

K získání protilátek potřebných pro vývoj imunochemických metod je však potřeba imunogenů, tedy haptenů vázaných na bílkovinný nosič. V uvedené práci se zabývám přípravou haptenů připojením spojovacího můstku na molekulu pohlavního hormonu a to hlavně do stericky bráněních pozic.

Práce byla podpořena projekty MV ČR č. VG20112015045, MŠMT ČR MSM6046137305, a GA ČR 304/10/1951 a P503/11/0616.

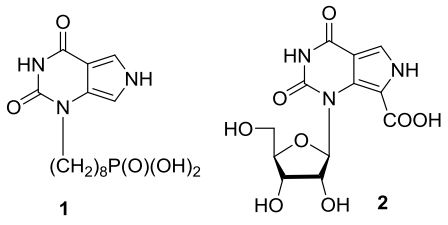
3Po28
8-AZA-7,9-DIDEAZAXANTHINOVÉ NUKLEOSIDY

David Mařák, Miroslav Otmar, Marcela Krečmerová

Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky, v.v.i., Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6 –Dejvice, marak@uochb.cas.cz

Donedávna nebyly pyrrolo[3,4-*d*]pyrimidiny (8-aza-7,9-dideazapuriny) vůbec používány pro syntézu analogů nukleosidů a nukleotidů, ačkoli jejich podobnost s přirozenými puriny je značná a jejich příprava není příliš náročná. Jedinou výjimkou je námi již dříve publikovaná syntéza 3-(8-fosfonooktyl)-8-aza-7,9-dideazaxanthinu (**1**) a některých dalších látek tohoto typu, které byly identifikovány jako účinné inhibitory lidské rekombinantní a bakteriální thymidinfosforylázy.[1]

Vzhledem k tomu, že předchozí použití 8-aza-7,9-dideazaxanthinu vedlo k biologicky aktivnímu acyklickému nukleosidfosfonátu a ukázalo, že 8-aza-7,9-dideazaxanthin je schopen úspěšně mimikovat přirozenou nukleobasi, rozhodli jsme se připravit sérii nukleosidů (např. látka **2**) s takto modifikovaným purinem. Jejich syntéza vycházela z 5-nitrouracilu, který byl glykosylován v poloze 1 chráněným cukerným prekusorem. Poté byla provedena kondenzace s benzylisokyanoacetátem ve smyslu Barton-Zardovy reakce vedoucí ke vzniku pyrrolo[3,4-*d*]pyrimidinového skeletu a odstraněny chránící skupiny.



Obr. 1

Tento projekt byl podporován výzkumným záměrem ÚOCHB AV ČR RVO 61388963 a grantem Ministerstva průmyslu a obchodu FR – TI4/625.

[1] Mařák D., Otmar M., Votruba I., Dračínský M., Krečmerová M.: *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2011**, *21*, 652-654.

3Po29
DEVELOPMENT OF NOVEL QUATERNARY DETERGENTS AS PART OF DECONTAMINATION AND DISINFECTION MEANS

Marek, J.[1,3,5], Soukup, O. [2]; Cabal, J.[1] Kuca, K.[4]

[1] Department of Toxicology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic
[2] Department of Medicinal Chemistry and Drug Control, Faculty of Pharmacy, Charles University, Czech Republic
[3] Department of Epidemiology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic
[4] Centre of Advanced Studies, Faculty of Military Health Sciences, University of Defense, Hradec Kralove, Czech Republic
[5]Department of Pharmaceutical Chemistry nad Drug Control, Faculty of Pharmacy, Cherles University, Hradec Králové
marekjanmgr@seznam.cz

The cationic detergens are well-known widespread group of compounds. They are used in many cases in pharmaceutical, chemical or food industry. We have focus our attantion also on usage in military sector. Chemical and biological warfare agents are considered to be threat. Their misuse by terrorists is well discussed and due to this, many institutes throughout the world are interested in development of novel countermeasures against them. At our department, we are interested in development on novel antidotes against nerve agents and development of novel detergents which should be used as part of the decontamination and disinfection mixtures. Nowadays, we have prepared several series of novel quaternary detergents derived from benzalkonium salts. Instead of benzyl group, we have used pyridinum ring with different substituents. These compounds are currently tested for their decontamination and disinfection potency.

The work was supported by the Long Term Development Plan 1011
The work is co-financed by the European Social Fund and the state budget of the Czech Republic. Project no. CZ.1.07/2.3.00/30.0061

3Po30
PRÍPRAVA KOMPOZITOV NA BÁZE ELASTOMÉRNEJ MATRICE A UHLÍKOVÝCH NANOTRUBIČIEK PRE SENZORICKÉ APLIKÁCIE

Jana Tabačiarová[1], Matej Mičušík[1], Jürgen Pionteck[2], Mária Omastová[1]

[1] Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovensko
[2] Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, 01069 Dresden, Germany

Senzorické materiály sa používajú v priemysle, biomedicíne a farmakológii na detekciu plynov, kvapalín, prípadne biomolekúl. Uhlíkové nanotrubičky (CNT) sú vďaka svojím mechanickým a elektrickým vlastnostiam často používané nanoplnivo do polymérnych kompozitov.

Táto práca sa zaoberá prípravou polymérnych kompozitov použitím rôznych polymérnych matríc a CNT, ktoré môžu byť vhodné ako kvapalné a/alebo plynné senzory. Vhodným plnením CNT do polymérnych matríc sa získa materiál s elektrickou vodivosťou. Senzorický mechanismuz takýchto materiálov je založený na napučiavaní polymérnej matrice po kontakte s parami alebo kvapalinami, čo vyústi do prerušenia elektrických kontaktov CNT v kompozite a zaznamená sa pokles vodivosti [1]. Navyše aj adsorpcia molekúl analyzovanej látky spôsobí pokles vodivosti CNT siete. Aby nedochádzalo rozpusteniu polymérneho kompozitu, čo je častá nevýhoda takéhoto typu senzora, bude sa testovať použitie amfifilného polyméru ako polymérnej matrice. Na dosiahnutie lepšej dispergácie CNT v polymérnej matrici sa použila nekovalentná modifikácia ich povrchu pomocou pyrénového tenzidu. Kompozity boli spracované do rôznych tvarov, prípadne tenkých filmov a študovali sa ich senzorické vlastnosti na detekciu plynov a kvapalín.

Poďakovanie. Táto práca bola finančne podporená Slovenskou agentúrou na podporu výskumu a vývoja pod projektovým číslom APVV 0593-11.

[1] Thostenson E.T, Chou T.-W., Appl Phys Lett 2007, 91(22)

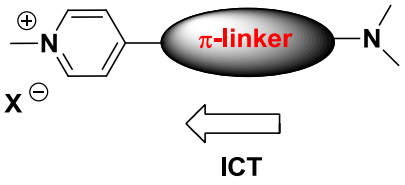
3Po31
PYRIDINIUM BETAINY JAKO AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH

David Miklík, Filip Bureš

Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, st27022@student.upce.cz

Push-pull systémy svojí strukturou umožňují intramolekulární přenos náboje (ICT) z donoru elektronů (D) přes π-konjugovaný systém k akceptoru (A). Tento jev způsobuje výraznou polarizaci molekuly, která představuje dipól a vykazuje nelineárně optické vlastnosti (NLO). Organické dipolární D-π-A systémy jsou v poslední době hojně využívány jako aktivní součásti optoelektronických zařízení typu optická paměť, OLED, OPVC nebo DSSC. Typickými donory a akceptory v takovýchto systémech jsou substituenty s kladnými resp. zápornými I a M efekty jako jsou -OR, $-NR_2$ resp. $-NO_2$, -CN skupiny [1]. V poslední době jsou však pro konstrukci push-pull molekul využívány rovněž pěti nebo šestičlenné heterocyklické sloučeniny [2, 3]. Dle typu připojeného heterocyklu, mohou tyto části vystupovat jako elektron donory (pětičlenné cykly, typicky např. thiofen) nebo elektron akceptory (šestičlenné heterocykly, typicky např. pyridin, pyrazin). Elektron akceptorní vlastnosti dusíkatých heterocyklických sloučenin lze navíc podpořit kvarternizací dusíkového atomu. V případě pyridinu pak hovoříme o pyridinium betainech.

V předkládaném příspěvku budou diskutovány možnosti příprav D-π-A systémů s *N*-methylpyridinium akceptorní jednotkou a *N*,*N*-dimethylamino donorem pomocí cross-coupling reakcí. Uspořádání, počet akceptorních a donorních jednotek jakožto π-linker spojující obě části byly systematicky modifikovány s cílem studovat vztahy typu struktura-vlastnosti (Obr. 1).



Obr. 1 Push-pull systém na bázi pyridinium betainů.

Tato práce byla podpořena Grantovou agenturou České republiky (13-01061S).

[1] F. Bureš: *Chem. Pap.* **2013**, v tisku.
[2] J. Kulhánek, F. Bureš: *Beilstein J. Org. Chem.* **2012**, *8*, 25-49.
[3] F. Bureš, H. Čermáková, J. Kulhánek, M. Ludwig, W. Kuznik, I. W. Kityk, T. Mikysek, A. Růžička: *Eur. J. Org. Chem.* **2012**, 529-538.

3Po32
NOVEL AND RE-EVALUATED ACTIVITIES IN THE SERIES OF N-ALKYLATED-TACRINE DERIVATIVES: SYNTHESIS, BIOLOGICAL EVALUATION AND MOLECULAR MODELING

Jan Korabecny [a, d], Eugenie Nepovimova [a, d], Ladislav Janovec [b], Anna Horova [a], Filip Zemek [a], Kamil Musilek [c, d], Katarina Spilovska [a, d], Kamil Kuca [d, e *]

[a] *Department of Toxicology, Faculty of Military Health Sciences, University of Defence, Trebesska 1575, 500 0, Hradec Kralove, Czech Republic*
[b] *Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Faculty of Science, P.J. Safarik University, Moyzesova 11, 041 67 Kosice, Slovak Republic*
[c] *Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Hradec Kralove, Rokitanskeho 62, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*
[d] *University Hospital of Hradec Kralove, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic*
[e] *Centre of Advanced Studies, Faculty of Military Health Sciences, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Kralove, Czech Republic*
Evzenie.N@seznam.cz

The introduction of tacrine in the early nineties markedly changed pharmacological treatment of Alzheimer`s disease (AD) rationally coming out of the cholinergic hypotheses enhancing memory and cognition. Up to date, searching for novel tacrine derivatives is still being at the forefront of scientific efforts. Within this work, we describe synthesis and biological assessment in the series of N-alkylated tacrine derivatives and some 7-methoxytacrine analogues. The biological evaluation revealed that some of these molecules are good human acetylcholinesterase (hAChE) and human butyrylcholinesterase (hBChE) inhibitors in the nanomolar ranges. Molecular modeling performed on inhibitor 18 (tacrine dodecane) confirmed that this compound, as expected and similarly to tacrine, binds to the catalytic site of hAChE. To sum up, from these results we conclude that tacrine dodecane analogue 18 can be considered as an attractive therapeutic molecule and it could become a candidate for further studies in AD area.

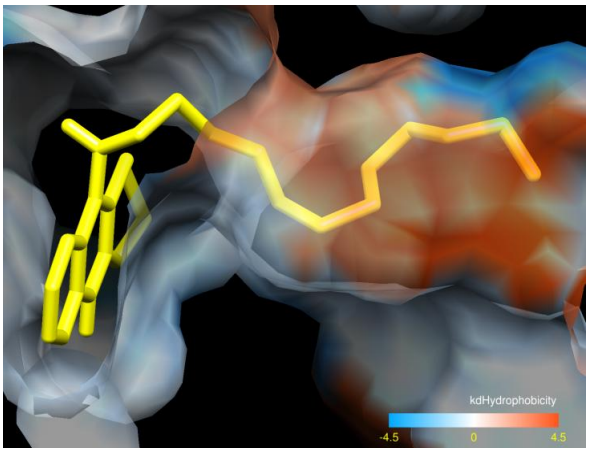


Figure 1. Top-score docking pose for derivatives 18 (yellow) depicted putative structural orientation in the active-site gorge of the hAChE. For clarity only enzyme active site is shown as a hydrophobic surface pocket.

Authors appreciate the support of the Grant Agency of the Czech Republic (No. P303/11/1907), the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (No. SVV 267 001), Grant Agency of Charles University in Prague (No. 41310), Post-doctoral project (No. CZ.1.07/2.3.00/30.0044), Long Term Development plan – 1011, VEGA 0079, CEX of SAS Nanofluid, APVV 0171-10, project 26220220005 in the framework of the Structural Funds of European Union and the project (Ministry of Health, Czech Republic) for conceptual development of research organization 00179906. Financial support from the Slovak Grant Agency VEGA (No. 1/0672/11) are also gratefully acknowledged. Molecular graphics images were produced using a UCSF Chimera package from the Resource for Biocomputing, Visualization, and Informatics at the University of California, San Francisco (supported by NIH P41 RR- 01081).

3Po33
INVESTIGATION OF BEECH WOOD MODIFIED BY RADIO-FREQUENCY PLASMA

Igor Novák[1], Anton Popelka, Vladimír Vanko[2], Ivan Chodák[1], Jozef Preťo[2], Mária Šivová[1]

[1]*Ústav polymérov, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, upolnovi@savba.sk*
[2]*VIPO, a.s., Gen. Svobodu 1069/4, 958 01 Parizánske, Slovakia, vvanko@stonline.sk*

The bonding of wood after discharge plasma surface modification is of considerable interest with the respect to construction of the strongest wood adhesive joints [1 – 3]. Great efforts have been made in developing various kinds of furniture using wood or plastics veneers in adhesive joints wood-adhesive-veneer. The radio-frequency (RF) discharge plasma at reduced

pressure is currently an efficient method for modification of surface and adhesive properties of wood, and is considered as the 'green' ecologically friendly method. The pre-treatment of wood surface using low-temperture plasma is attractive for various wood applications, mainly because of their lower cost. Polar component of surface energy of wood is associated with the presence of acid-base forces (electron donor–acceptor bonds. The enhancement of wood wettability is a necessary condition to promote a better adhesion with a water-based adhesives and coatings, which is currently being studied. The contact angles of water deposited on beech wood surface showed a steep decrease after activation by RF-plasma in air. The surface energy and its polar component of beech wood have been increased with time of activation by RF-plasma.

Acknowledgements. Authors are grateful to financial supports by the Ministry of Education of the Slovak Republic project No. 26220220091 by Research & Development Operational Program funded by ERDF, as well as the project „Application of Knowledge-based Methods in Designing Manufacturing Systems and Materials" the project No. MESRSSR 3933/2010-11,and project of the Slovak Academy of Sciences (Grant VEGA 2/0185/10).

[1] M. Kiguchi, Surface modification and activation of wood. In: D. N. Hon (Ed.) S. chemical modification of lignocellulosic materials. Marcel Dekker, New York, 1996, p. 197.
[2] A. Wolkenhauer, G. Avramidis, E. Hauswald, H. Militz,W. Viol, Intern. Adesion and Adhesives 29 (2009) 18.
[3] M. N. Acda, E. E. Devera, R. J. Cabangon, H. J. Ramos, Intern. J. Adhesion and Adhesives 32 (2012) 70.

3Po34
MICRO-WAVE ASSISTED SYNTHESIS OF ALKOXYPHENYLIMIDAZOLES

Jan Pérko, Patrik Pařík

Institute of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology, University of Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic, Patrik.Parik@upce.cz

Recently, a lot of derivatives of phenylimidazoline and phenylimidazole (ethers, esters, imines and bisimines, carbamates, and ureas) were synthesized and their properties were studied. Clay-supported heterogeneous catalysis of Henry reaction was studied [1], inhibition activities against cholinesterases and antimycobacterial activities were measured [2], complexation properties were investigated [3].

In our contribution we present the synthesis of new serie of alkoxyphenylimidazolines/imidazoles. From starting 2-(2-hydroxyphenyl)-1*H*-imidazoline seven new 2-(2-alkoxyphenyl)-1*H*-imidazolines we prepared using halogenealkanes with C5 – C8. Oxidative aromatizations we used to transformation them to seven new 2-(2-hydroxyphenyl)-1*H*-imidazoles.
Conventional methods using Pd/C, activated manganese dioxide, potassium nitrosodisulfonate (Fremy's salt), and Magtrieve™ were used. Concurrently micro-wave assisted syntheses using Magtrieve™ we performed. Comparison of conventional and micro-wave syntheses we discuss.

[1] Holešová S., Pařík P., Ludwig M.: *J. Heterocyclic Chem.* **2011**, *48*, 907-914.
[2] Pařík P., Jansa J., Holešová S., Marek A., Klimešová V.: *J. Heterocyclic Chem.* (accepted)
[3] Pařík P., Chlupatý T.: *J. Heterocyclic Chem.* (accepted)

3Po35
CÍLENÁ SYNTÉZA DERIVÁTŮ 2-HYDROXY-*N*-[(2S)-1-OXO-1-(FENYLAMINO)ALK-2-YL]BENZAMIDŮ

Karel Pauk[a], Aleš Imramovský[a], Jiří Hanusek[a], Vladimír Pejchal[a]

[a]*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko technologická, Univerzita Pardubice, 532 10 Pardubice*
Karel.Pauk@seznam.cz

Deriváty 2-Hydroxy-*N*-[1-(2-hydroxyfenylamino)-1 oxoalkan-2- yl]benzamidů ***III*** jsou originální organické látky. Tyto sloučeniny mohou sloužit jako potenciální antimikrobiální léčiva proti různým kmenům tuberkulózy, jako je *Mycobacteriumc tuberculosis* (*M. tbc*), *M. avium* nebo *M. kansasii*.

Syntéza těchto látek spočívala v esterifikaci substituovaných salicylanilidů ***I*** , následné deprotekci a přesmyku, kdy vznikal zmíněný hydroxy-*N*-(fenylamino)-oxoalkylbenzamid (diamid) ***III***. (Schéma 1)[2].

Tento přesmyk není ještě zcela objasněn. Pro účely testování biologické aktivity diamidů a jejich derivátů byla zvolena rozdílná, výhodnější syntetická cesta. Výchozí anilín ***IV*** reaguje s *N*-chráněnou aminokyselinou, která po deprotekci reaguje se substituovanou kyselinou acetyl salicylovou. Po hydrolýze vzniká hydroxy-*N*-(fenylamino)-oxoalkylbenzamid (diamid) ***VII*** (Schéma 2). Výhoda této cesty je, že se v reakční

sekvenci získá jak diamid ***VII***, tak i *O*-acetyl derivát ***VI***, který jinak připravit nelze, jelikož přímá acetylace diamidu ***III*** resp. ***VII*** je nemožná.

Připravená prezentace obsahuje i tabulku a syntézu nových derivátů salicylanilidů.

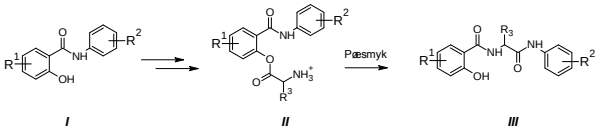


Schéma 1: Syntéza diamidu

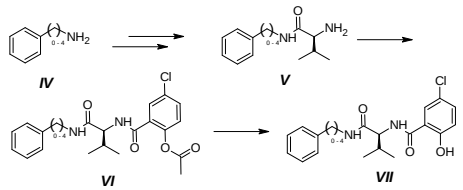


Schéma 2: Syntéza derivátů diamidu

Autoři děkují za finanční podporu Ministerstva školství, mládeže tělovýchovy České Republiky (Projekt SGFChT 02 UPa).

[1] J. Vinšová, A. Imramovský, M. Krátký, J. M. Férriz, K. Palát, A. Lyčka, A. Růžička: Tetrahedron Lett., *51, (1), 23-26,* (2010).
[2] Imramovský A., Vinšová J., Férriz J. M., Kuneš J., Pour M., Doležal M.: Tetrahedron Lett. *47*, 5007-5010 (2006).

3Po36
KOMPLEXY PALADIA OBSAHUJÍCÍ CHIRÁLNÍ BENZTHIAZOLOVÉ LIGANDY

Vladimír Pejchal[1], Zdeňka Padělková[2], Aleš Růžička[2]

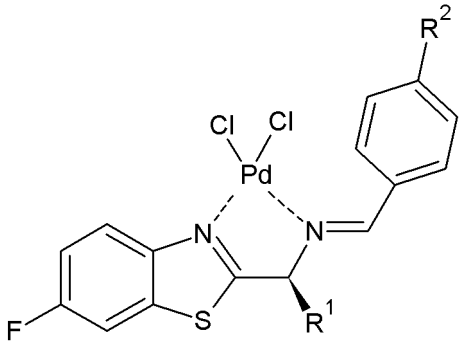
[1] Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika, vladimir.pejchal@upce.cz

[2] Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika.

Benzthiazoly jsou popsanou skupinou sloučenin s širokou oblastí biologických aktivit, a to především antibakteriálních, fungicidních , virucidních i protinádorových [1]. Benzthiazolový kruh je také přítomný v řadě přírodních látek rozmanité biologické aktivity [2].

Schiffovy báze odvozené od aminů a aldehydů jsou důležitou třídou ligandů, které se koordinují na kovové ionty přes dusík azomethinové skupiny [3]. Tyto komplexy hrají velmi důležitou roli ve vývoji koordinační chemie.

Byla připravena série nových paladiových komplexů Schiffových bazí odvozených z opticky čistých substituovaných benzothiazolů (obr. 1).



R^1 = methyl, isopropyl, benzyl

R^2 = Cl, F, OCH_3, $N(CH_3)_2$.

Obr. 1:

Poděkování: Autoři děkují Grantové agentuře ČR (grant č. P207/12/0223) za finanční podporu.

[1] S. Bondock, W. Fadaly, M.A. Metwally: Eur. J. Med. Chem., 45, (2010) 3692-3701.
[2] C.J. Lion, C.S. Matthews, G. Wells, T.D. Bradshaw, M.F.G. Stevens, A. D. Westwell: Bioorg. Med. Chem. Lett., 16, (2006) 5005-5008.
[3] Bradshaw T. D., Bibby M.C., Double J.A., Fichtner I., Cooper P.A., Alley M.C., Donohue S., Stinson S.F., Tomaszewjski J.E., Sausville E.A., Stevens M.F.G.: Mol. Cancer Therapeutics, 1, (2002) 239-246.

3Po37
SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A ANTIMIKROBIÁLNÍ AKTIVITA 1-[(1*R*)-1-(6-FLUOR-1,3-BENZTHIAZOL-2-YL)ETHYL]-3-SUBSTITUOVANÝCH FENYL AMIDŮ

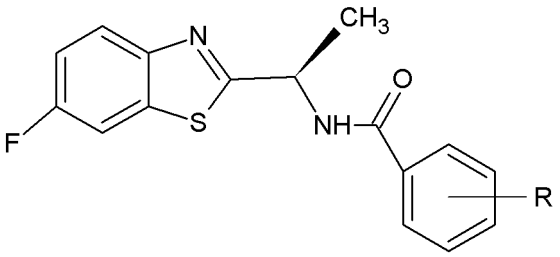
Marcela Pejchalová[1], Vladimír Pejchal[2], Zdeňka Padělková[3]

[1] Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika, marcela.pejchalova@upce.cz
[2] Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika
[3] Katedra obecné a anorganické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká Republika

Benzthiazoly jsou popsanou skupinou sloučenin s širokou oblastí biologických aktivit, a to především antibakteriálních a fungicidních , virucidních i protinádorových [1,2]. Benzthiazolový kruh je také přítomný v řadě přírodních látek rozmanité biologické aktivity [3]. Benzthiazoly mohou sloužit jako jedinečné výchozí komponenty pro vývoj experimentální léků. Byla připravena série nových opticky aktivních látek. 1-[(1*R*)-1-(6-fluor-1,3-

benzthiazol-2-yl)ethyl]-3-substituované phenyl amidy (obr. 1) byly syntetizovány reakcí R – 1-(6-fluorbenzthiazol-2-yl)ethanaminu se substituovanými benzoylchloridy. Připravené sloučeniny byly charakterizovány ^{1}H, ^{13}C and ^{19}F NMR spektrometrií, rentgenostrukturní a elementarní analýzou. Optická aktivita byla charakterizována měřením optické otáčivosti. Z biologických aktivit byly studovány antimikrobiální a antifungální účinky na patogenní G^{+} a G^{-} bakterie, kvasinky rodu *Candida* a *Aspergillus clavatus*. Hodnoty minimální inhibiční koncentrace (MIC) zjištění diluční agarovou metodou, byly porovnány s hodnotami MIC pro antibiotika chloramfenikol a cefoperazon.

U několika připravených amidů byly stanoveny velmi dobré inhibiční vlastnosti.



Obr. 1:

Poděkování: Autoři děkují Technologické agentuře ČR (grant č. TA02020466) za finanční podporu.

[1] S. Bondock, W. Fadaly, M.A. Metwally, Eur. J. Med. Chem. 45 (2010) 3692-3701.
[2] V. Sekar, P. Perumal, S. Gandimathi, S. Jayaseelan, V. Rajesh, Asian J. Chem. 22 (2010) 5487-5492.
[3] C.J. Lion, C.S. Matthews, G. Wells, T.D. Bradshaw, M.F.G. Stevens, A. D. Westwell, Bioorg. Med. Chem. Lett. 16 (2006) 5005-5008.

3Po38
TERMORESPONZIVNÍ HYBRIDNÍ MATERIÁLY GLYKOGEN-GRAFT-POLY(2-ALKYL-2-OXAZOLIN) PRO BIOMEDICINSKÉ POUŽITÍ

Aneta Pospíšilová[1], Martin Hrubý[1], Markéta Jirátová[2], Jan Kovář[2]

[1]*Institute of Macromolecular Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v. v. i., Heyrovsky Sq. 2, 162 06 Prague 6, Czech Republic*
[2]*Institute of Clinical and Experimental Medicine, 1958/9, 140 21 Prague 4, Czech Republic*

Poly-(2-alkyl-2-oxazoliny) jsou poměrně nová skupina biokompatibilních polymerů, kterým je věnována velká pozornost pro jejich biokompatibilitu, možnost přípravy polymerů rozmanitých vlastností díky rozmanitosti monomerů a možnost zajímavých postpolymeračních modifikací. Glykogen je dlouho známý živočišný polysacharid typický vysokým stupněm větvení a kulovým tvarem molekuly. Důležitou vlastností pro medicinské využití je jeho velmi pomalá extracelulární biodegradace a snadná a rychlá degradace intracelulárně. Spojením těchto látek získáváme termoresponzivní materiál, který si zachovává hydrofilní charakter i nad kritickou teplotou a umožňuje účinnou adhezi buněk a jeho stavové chování a rychlost degradace jsou nastavitelné změnou obsahu, složení a molekolovou hmotnost polyoxazolinových roubů.Tyto vlastnosti předurčují glykogen-*graft*-poly(2-alkyl-2-oxazoliny) k rozsáhlému využití jako injekovatelná depa v tkáňovém inženýrství a pro cílenou radioterapii a chemoterapii.

Glykogen-*graft*-poly(2-alkyl-2-oxazoliny) lze připravit kationtovou polymerací 2-alkyl-2-oxazolinu za iniciace allylbromidem a následnou nukleofilní substitucí bromu sodnou solí glykogenu. Takto jsme připravili řadu konjugáty o různém obsahu, složení a molekulové hmotnosti polyoxazolinových roubů. Fázové chování v roztoku jsme charakterizovali pomocí rozptylových metod a cryo-TEM. Zjistili jsme, že s rostoucím obsahem polyoxazolinu teplota fázového přechodu klesá, stejně jako s molekulovou hmotností polyoxazolinových řetězců a s hydrofobicitou alkylových skupin. *In vitro* testování na HepG2 buňkách potvrdila biokompatibilitu a biodegradovatelnost materiálu.

Tato práce vznikla za podpory grantu Akademie věd České republiky č. M200501201, grantu 2012CZ006 Akademie věd České republiky – bilaterální spolupráce s Argentinou a grantu Ministerstva průmyslu a obchodu č. TIP FRTI4/625.

3Po39
ŠTÚDIUM OXIDAČNÉHO ŠTIEPENIA C=C DVOJITEJ VÄZBY SUBSTRÁTOV VYCHÁDZAJÚCICH Z KYSELINY ŠIKIMOVEJ PRI SYNTEÉZE 3-DEOXY-2-ULOZONOVÝCH KYSELÍN

Miroslav Psotka[1], Jozef Gonda[1], Miroslava Martinková[1]

[1]*Univerzita P.J. Šafárika, Šrobárova 2, 041 80 Košice, miroslav.psotka@gmail.com*

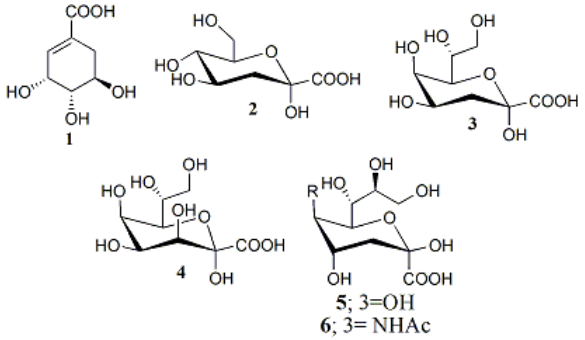
V posledných rokoch sa zvýšil výskyt bakteriálnych vírusových ochorení, ktoré sú rezistentné voči komerčne dostupným a používaním antibiotikám. Je to spôsobené

tvorbou nových mutácii, ktorých liečba vyžaduje prípravu nových liečiv zo skupiny antibakteriálnych a antivirálnych látok.

Dôležité je štúdium biosyntézy lipopolysacharidov a kyseliny šikimovej (**1**), ktoré sú zodpovedné za rast bunkovej steny v rastlinách a baktériách. V neposlednom rade je potrebné študovať aj vírusovo špecifické enzýmy, s cieľom vyvinúť špecifické inhibítory daných enzýmov. Ich využitím by sme dosiahli inhibíciu nežiaducich procesov a zabránili by sme aj ďalšiemu šíreniu vírusu do organizmu.

Ulozonové kyseliny (ketoaldónové kyseliny) sú derivátmi monosacharidov, u ktorých je aldehydická funkčná skupina oxidovaná na karboxylovú kyselinu a v štruktúre obsahujú ketoskupinu. Tieto zlúčeniny sú dôležitou súčasťou rôznych biologických procesov.

Bližšie špecifikovaná bude podskupina 3-deoxy-2-ulozonových kyselín. Zameriame sa na vlastnosti a charakteristiku najznámejších zástupcov DAH (**2**), KDO (**3**), KO (**4**), KDN (**5**) a NANA (**6**) (obr. 1).[1,2,3]



Obr. 1 Kyselina šikimová a zástupcovia 3-deoxy-2-ulozonových kyselín

V experimentálnej časti sme navrhli stratégiu syntézy DAH (**2**) z kyseliny šikimovej (**1**), s využitím rôznych druhov chrániacich funkčných skupín.

[1] Wardrop D.J. a Wimming Zhang *Tetrahedron Lett.* **2002**, *43*, 5389-5391.
[2] Dondoni A.; Marra A. a Merino P. *J.Am.Chem.Soc.* **1994**, *116*, 3324-3336.
[3] Crestia D.; Demuynck C. a Bolte J. *Tetrahedron* **2004**, *60*, 2417-2425.

3Po40

VLIV KLIMATICKÝCH PODMÍNEK NA MECHANICKÉ VLASTNOSTI VLÁKEN Z HYALURONANU SODNÉHO

Jolana Ščudlová[1], Jiří Běťák[1], Tomáš Pitucha[1], Vladimír Velebný[1]

[1]*Contipro Biotech s.r.o, Dolní Dobrouč 401, 561 02, scudlova@contipro.com*

Kyselina hyaluronová je přirozenou součástí lidského těla. Díky svým fyzikálním, chemickým a biologickým vlastnostem nachází široké uplatnění v medicíně, například v oblasti ortopedie, hojení ran, nebo jako antiadhezivní prostředek při prevenci pooperačních srůstů. Aplikačně zajímavou formu představuje hyaluronan ve formě flexibilní textilie, kterou lze jednoduše střihem upravovat na potřebnou velikost. Pro tyto účely byla optimalizována technologie mokrého zvlákňování hyaluronanu do formy textilně zpracovatelných nekonečných vláken [1, 2].

Polysacharidy ve své nativní podobě jsou obecně hygroskopické materiály, proto vliv klimatických podmínek při zpracování vláken, zvláště pak teplota a vlhkost, jsou klíčovými veličinami, které rozhodují o jejich textilní zpracovatelnosti. V rámci této práce byl sledován vliv klimatických podmínek na mechanické vlastnosti hyaluronanových vláken, jejich zpracovatelnost a na stabilitu při dlouhodobém skladování.

Z dosažených výsledků vyplývá, že vlákna z hyaluronanu sodného reagují na změnu relativní vlhkosti vzduchu v řádu několika desítek sekund a že pro dlouhodobé skladování je lépe vlákna uchovávat za nižší teploty bez ohledu na relativní vlhkost. Optimálního poměru pevnosti a tažnosti vláken z hlediska jejich zpracovatelnosti na běžných textilních strojích bylo dosaženo při relativní vlhkosti 50±5%.

[1] Rupprecht A.; Wet Spinning of Hyaluronic Acid. Preparation of Oriented Samples. Acta Chemica Scandinavica; 1979; 33; 779-780.
[2] Běťák J., Ščudlová J., Klein P., Matějková I., Mašek D., Velebný V.; Procesing of monofilaments from biodegradable polysaccharide materials. Chem. Listy; 2008; 99, 1234-2345.

3Po41
STŘÍBRNÉ MONOLITICKÉ HPLC KOLONY PRO VAZBU RADIOAKTIVNÍHO JÓDU

Ondřej Sedláček[1, 2], Jan Kučka[1], František Švec[2], Martin Hrubý[1]

[1]Institute of Macromolecular Chemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic, public research institution, Heyrovsky Sq. 2, Prague 6, CZ-16206, Czech Republic, sedlacek@imc.cas.cz
[2] The Molecular Foundry, E. O. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, U.S.A.

Radiojodované sloučeniny mají v medicíně široké využití závislé na použitém izotopu jodu. Stejná molekula může být využita pro zobrazování nádorů (^{123}I pomocí SPECT tomografie, ^{124}I pomocí PET tomografie), jejich terapii (β^- radioterapie pomocí ^{131}I s následným SPECT zobrazením) či tvorbu *in vitro* testovacích kitů při použití izotopů s delším poločasem, jako je ^{125}I ($T_{1/2}$=59,408 dní). Jedním příkladem je *m*-iodobenzylguanidin (Iobenguan, MIBG) používaný jako SPECT diagnostikum a terapeutikum adrenergních zhoubných tkání, jako jsou phaeochromocytomy a neuroblastomy. Připravuje se nejčastěji izotopovou výměnou neradioaktivního derivátu. Nevýhodou této metody je obvykle nízký výtěžek, dále pak obtížná separace pomocí HPLC, která produkuje množství radioaktivního odpadu.

V tomto příspěvku popisujeme přípravu nové monolitické HPLC kolony s ukotvenými stříbrnými nanočásticemi, která slouží jako předkolona zachytávající veškerý organicky nevázaný jód. Kolona byla připravena radikálovou polymerací glycidyl methakrylátu a ethylendimethakrylátu v kolonovém pouzdře v přítomnosti porogenů. Vzniklý monolit byl modifikován reakcí s cystaminem a následně borohydridem sodným. Za vzniklé thiolové skupiny byly poté přichyceny stříbrné nanočástice. Obsah stříbra v monolitu byl 12% hm. Na připravené koloně bylo ověřeno zachytávání jódu, respektive jodidu sodného, metodou frontální eluce byla změřena kapacita 1,42 mg/cm kolony pro I_2 and 0,99 mg/cm pro NaI. Funkce kolony byla ověřena při separaci radiojodovaného MIBG, kde zachytila veškerý nenavázaný jodid.

Tato práce vznikla za podpory grantu Akademie věd české republiky č. M200501201, grantu MŠMT – bilaterální spolupráce s Argentinou a grantu Ministerstva průmyslu a obchodu č. TIP FRTI4/625.

3Po42
VYUŽITIE ALKYLOXYACETALDEHYDOV V ENANTIOSELEKTÍVNEJ SYNTÉZE MEDZIPRODUKTOV OSELTAMIVIRU

Pavol Tisovský[1], Mária Mečiarová[1], Radovan Šebesta[1]

Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra organickej chémie, Mlynská dolina, 842 15 Bratislava, Slovenská republika; tisovsky@fns.uniba.sk

Oseltamivir fosfát je aktívnou zložkou *Tamiflu*®, jedného z najúčinnejších antivirotických liečiv. Toto liečivo je využívané pri liečbe rôznych druhov chrípky vrátane podtypu H5N1.[1] Vďaka svojej účinnosti oseltamivir púta pozornosť jednak akademickej obce a taktiež priemyslu. Tento záujem vyústil do niekoľkých syntetických prístupov vedúcich k príprave oseltamiviru. [2] Medzi najvýznamnejšie patrí syntetický prístup využívajúci enantioselektívnu Michaelovu adíciu. Priekopnícku robotu v tejto oblasti urobil Hayashi. [3] Základnú časť oseltamiviru je možné vybudovať z jednoduchých achirálnych východiskových látok s využitím chirálneho organokatalyzátora. Keďže aldehydy, využívané pri syntéze oseltamiviru a jeho derivátov, podliehajú rozkladu študovali sme možnosť využitia acetálov príslušných aldehydov, ktoré sme po deprotekcii použili pri enantioselektívnej Michaelovej adícii vedúcej k dôležitému medziproduktu syntézy oseltamiviru.

[1] Lew, W., Chen, X., Kim. C. U. *Curr. Med. Chem.* **2000**, *7*, 663-672.
[2] Shibasaki, M., Kanai, M., Yamatsugu, K. *Isr. J. Chem.* **2011**, *51*, 316-328.
[3] Ishikawa, H., Suzuki, T., Orita, H., Uchimaru, T., Hayashi, Y. *Chem. –Eur. J.* **2010**, *16*, 12616-12626.

3Po43
SYNTÉZA KONJUGÁTŮ PORFYRINŮ S TRILOBOLIDEM

Pavla Tomanová, Michal Jurášek, Pavel Drašar

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6 - Dejvice, pavel.drasar@vscht.cz

Porfyriny a jejich konjugáty nachází velké uplatnění v oblasti diagnózy (MRI) a léčby rakoviny (PDT). Vzhledem k tomu, že se jedná o látky vykazující emisi v červené oblasti spektra, je možné pozorovat jejich lokalizaci mikroskopií na živých buňkách. Konjugací porfyrinů je možno zvýšit jejich hydrofilitu a usnadnit přechod přes buněčnou membránu.

Neporfyrinová část má vliv na lokalizaci a následné působení uvnitř buňky[1]. V naší laboratoři jsme připravili konjugáty porfyrinů přímo s látkou, která má potenciální cytostatické účinky. Jedná se o derivát seskviterpenového laktonu trilobolidu se schopností inhibice Ca^{2+} ATPasy endoplazmatického retikula[2].

Konjugáty trilobolidu a porfyrinů byly připraveny 1,3-dipolární cykloadicí (click chemistry). Pro zvýšení rozpustnosti látky ve vodném médiu byl do molekuly zabudován polyethylenglykol (PEG). Toxicita a význam konjugátů *in vivo* a *in vitro* jsou nyní předmětem zkoumání.

[1] B. Di Stasio, C. Frochot, D. Dumas, Eur. J. Med. Chem., 40 (2005) 1111-1122.
[2] M. Wictome, M. Holub, J.M. East, Biochem. Biophys. Res. Commun., 199 (1994) 916-921.

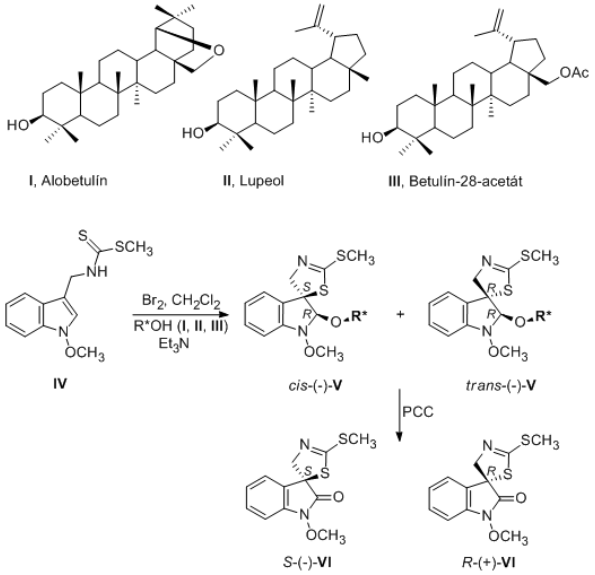
3Po44
STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA HYBRIDNÝCH MOLEKÚL ODVODENÝCH OD SPIROINDOLÍNOVÝCH FYTOALEXÍNOV A BETULÍNOV

Lucia Tomášová[1], Mária Vilková[1], Jan Šarek[2], Mariana Budovská[1], Jozef Gonda[1]

[1]*Univerzita P. J. Šafárika, Prírodovedecká fakulta, Ústav chemických vied, Katedra organickej chémie, Moyzesova 11, 040 01 Košice, Slovenská republika, lucia.tomasova@student.upjs.sk*
[2]*Univerzita Palackého, Přírodovědecká fakulta, Katedra organické chemie, tř. 17. listopadu 1192/12, 771 46 Olomouc, Česká republika*

Indolové fytoalexíny, produkované rastlinami čeľade *Kapustovité* (*Brassicaceae*), predstavujú unikátnu skupinu prírodných látok z hľadiska ich neobvyklej štruktúry, chemických vlastností a biologickej aktivity. Špecifickú skupinu týchto zlúčenín tvoria spiroindolínové fytoalexíny, u ktorých asymetria molekuly spôsobená chirálnym spiroatómom je dôležitým kritériom ich biologických aktivít [1]. Cieľom tejto práce bolo preskúmať možnosti syntézy nových hybridných molekúl vytvorených kombináciou spiroindolín[3,5´]tiazolínového skeletu a protinádorovo aktívnych triterpénov **I**, **II**, **III**, ktoré disponujú zaujímavými aktivitami na rôznych bunkových líniách [2].

Pri štúdiu stereoselektívnej syntézy hybridných molekúl bola skúmaná spirocyklizačná reakcia 1-metoxybrasinínu (**IV**) prostredníctvom brómu v prítomnosti chirálnych sekundárnych alkoholov **I**, **II**, **III** zo skupiny betulínov ako nukleofilov. Vzniknuté *cis*-(-)-**V** a *trans*-(-)-**V** diastereoizoméry boli následne oxidované s PCC, pričom sa získali (*R*)-(+)-**VI** a (*S*)-(-)-**VI** enantioméry 1-metoxyspirobrasinínu vhodné na určenie absolútnej konfigurácie cieľových molekúl pomocou ECD experimentu. S cieľom pripraviť diastereoizomérne a enantiomérne čisté produkty bol študovaný vplyv rozpúšťadla a reakčnej teploty na stereoselektivitu spirocyklizácie. Zároveň boli pripravené aj 5-brómderiváty syntetizovaných diastereoizomérov s cieľom zvýšiť ich biologickú aktivitu elektrofilnou substitúciou na aromatickom jadre indolu.



Obr. 1 Syntetická stratégia

Táto práca vznikla za podpory projektov VVGS 52/12-13 a VEGA 1/0954/12.

[1] Pedras M. S. C., Yaya E. E., Glawischnig E.: Nat. Prod. Rep. *8*, 1381 (2011).
[2] Dahaen W., Mashentseva A. A., Seitembetov T. S.: Molecules *16*, 2443 (2011).

3Po45
SYNTÉZA, CHARAKTERIZACE A APLIKACE OPTICKY ČISTÝCH DERIVÁTŮ IDAZOLINŮ V ASYMETRICKÉ KATALÝZE

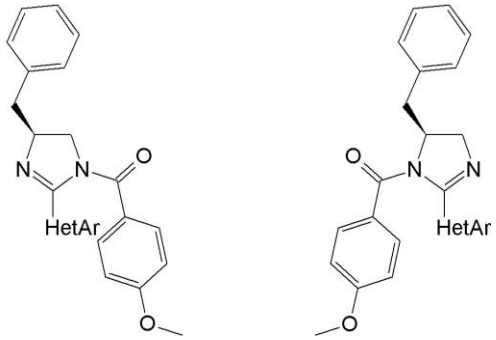
Jiří Tydlitát[1], Filip Bureš[1], Jiří Kulhánek[1]

[1]*Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, Pardubice, 53210, e-mail: jiri.tydlitat@upce.cz*

V návaznosti na předcházející výzkum syntézy a vlastností kondenzovaných cyklohexan-imidazolinů [1] a kafr-imidazolinů [2] je tato práce zaměřena na syntézu a charakterizaci

opticky čistých N1 a C2 substituovaných (4*S*)-4-benzylimidazolinů (obr. 1).

Cílem této práce je syntéza souboru (4*S*)-4-benzylimidazolinů s heteroaromatickými substituenty na C2 imidazolinového kruhu a 4-methoxybenzoyl substituentem na N1. Syntéza je založena na přípravě imidoesterů z heteroaromatických nitrilů s následnou kondenzací s (2*S*)-3-fenylpropan-1,2-diaminem. V poslední fázi jsou připraveny *N*-4-methoxybenzoyl imidazoliny za přítomnosti lithium bis(trimethylsilyl)amidu jako báze. Při této reakci dochází ke vzniku dvou regioisomerů, které jsou následně děleny pomocí sloupcové chromatografie. Tyto imidazoliny jsou následně testovány jako ligandy v asymetrické Henryho reakci.



Obr. 1 Připravované N1 a C2 substituované (4*S*)-4-benzylimidazoliny

[1] Tydlitát, J.; Bureš, F.; Kulhánek, J.; Růžička A. *Synthesis* **2010**, *22*, 3934.
[2] Tydlitát, J.; Bureš, F.; Kulhánek, J.; Mlostoń, G.; Růžička, A. *Tetrahedron:Asymmetry* **2012**, *23*, 1010.

3Po46
VÝVOJ RUTHENIOVÝCH KOMPLEXŮ S NHC-LIGANDY KATALYZUJÍCÍCH ANTI-MARKOVNIKOVSKOU HYDRATACI TERMINÁLNÍCH ALKYNŮ

Jiří Vavřík[1], Martin Kindl[1], Marek Kuzma[2], Stanislav Rádl[3], Petr Kačer[1]

[1]*Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6 – Dejvice, E-mail:vavrikj@vscht.cz*
[2]*Mikrobiologický ústav, AV ČR, Vídeňská 1083, 142 20 Praha 4*
[3]*Zentiva k.s., U Kabelovny 130, 102 37 Praha 10*

Velkou výzvou pro současné chemiky je vývoj nových účinných syntetických postupů umožňujících přímou syntézu různých funkcionalizovaných sloučenin. Adicí vody na terminální alkyny jsou karbonylové sloučeniny připraveny se 100% atomovou hospodárností. Mírné podmínky reakce také umožňují zavádění karbonylové funkce v koncových krocích syntézy bez nutnosti použití chránících skupin. Dosud bylo připraveno pouze malé množství rutheniových komplexů katalyzujících hydrataci terminálních alkynů s anti-Markovnikovskou regioselektivitou [1].

Hlavní nevýhodou běžně používaných fosfinových ligandů je jejich nízká stabilita vůči oxidativní adici. Vhodnou alternativu mohou představovat N-heterocyklické karbeny (NHC).

Byly připraveny NHC-ligandy obsahující ve své struktuře různě substituované dusíkaté heterocykly (pyridin, pyrimidin). Ty byly následně komplexovány s různými rutheniovými prekursory. Mezi jinými např. s tris (acetonitril)(η^5-cyklopentadienyl)ruthenium hexafluorofosfátem a cyklopentadienyl(η^6-naftalen)ruthenium hexafluorofosfátem, běžně používanými komplexy pro přípravu známých katalyzátorů anti-Markovnikovské hydratace [2]. V rámci konceptu zelené chemie byla testována také možnost ukotvení těchto katalyzátorů na pevném nosiči. Všechny připravené katalyzátory byly následně testovány pro hydrataci strukturně odlišných terminálních alkynů z hlediska jejich selektivity vůči žádanému aldehydickému produktu. S využitím NMR spektroskopie byla také provedena kinetická měření pro zjištění aktivity připravených katalyzátorů.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2013).

[1] Hintermann, L.; Labonne A.: Synthesis, (2007), 1121-1150.
[2] Kündig E. P.; Monnier, R. F.: Adv. Synth. Catal., (2004), 346, 901-904.

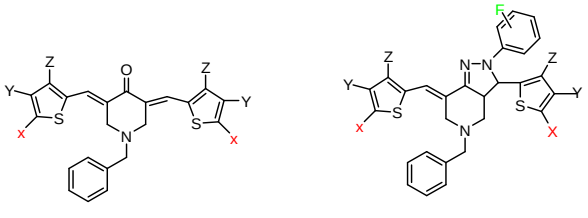
3Po47
SYNTHESIS AND STRUCTURAL STUDIES OF CROSS-CONJUGATED DIENONES DERIVED FROM N-BENZYLPIPERIDONE AND THIENYLALDEHYDES AS POTENTIAL BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS AND NOVEL OPTO-ELECTRONIC MATERIALS

Daniel Végh[a], Jana Boržíková[a], Peter Tisovský[†], Jozef Krajčovič[b], Michaela Halinkovičová[a], Viktor Milata[a] and Štefan Marchalín[a]

[a] *Institute of Organic Chemistry, Catalysis and Petrochemistry, Faculty of Chemical and Food Technology, Slovak University of Technology, Radlinského 9, 812 37 Bratislava, Slovakia*
[b] *Faculty of Chemistry, Brno University of Technology CZ-61200 Brno, Czech Republic*
email: daniel.vegh@stuba.sk

Cross-conjugated dienones of the bis-arylidenecykloalkanone series starting from early 1970[th] have been studied in relation to their cytotoxic properties and antitumor activities. Relatively recently antitumor activity of these material started to attribute to their structural similarity to *Indian spice curcumine* that possesses chemotherapeutic and some chemopreservative properties including antibacterial, anti-inflammatory antihepatoxic ways of action. It was found that cytotoxic properties of synthetic 3,5-bis(arylidene)-4-piperidones are significantly stronger than those for curcumine and than standard 5-fluorouracil[1-3].

Towards this goal, we prepared a series of new bis-thienylidene-4-piperidones based on the 1,5-diaryl-3-oxo- 1,4-pentadienyl pharmacophore as potential anti-leukemia active compounds and starting materials for the synthesis of new π-conjugated heterocycles with optoelectronic properties, light emitting materials and supramolecular structures in solid state.



X,Y,Z= H, Cl, Br, CH_3, Ph, 2-thienyl..

Structures of target compounds were proved by IR, UV, ^{1}H NMR, ^{13}C NMR spectral methods and by X-ray analysis.

This work was financially supported by grant from the Ministry of Education of the Slovak Republic No. 1/0660/11, APVV agency project 0038-11 and Research Center for Industrial Synthesis of Drugs, ITMS 26240220061, supported by the Research & Development Operational Programme funded by the ERDF.

[1] Dimmock J.R., Arora V.K., Duffy M.J., et,all: Drug.Des.Discov.12,19 (1994) Jing W., Wen M., Zhenjie N., Sijia X. Chin.J.Chem, 29, 2109 (2011)
[2] Müllen K., Wegner G.: Electronic Materials., The Oligomer Approach, Wiley-VCH, 1998.

3Po48
SYNTÉZA TRISUBSTITUOVANÝCH DERIVÁTOV AKRIDÍNU AKO NOVÝCH ANTIPROLIFERATÍVNYCH LÁTOK

Mária Vojtičková, Ladislav Janovec, Ján Imrich

Katedra organickej chémie, Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta, Univerzita P. J. Šafárika, Moyzesova 11, SK-041 67 Košice, maria.vojtickova@upjs.sk

Deriváty akridínu sa vyznačujú rozsiahlou biologickou účinnosťou, disponujú antimikrobiálnymi, antitumorovými a antivirálnymi vlastnosťami [1]. Medzi zaujímavý a vysoko aktuálny cieľ antitumorovej terapie je možné zaradiť enzým telomerázu a jej substrát, telomerickú DNA. Princíp terapie je založený na stabilizácii telomerickej DNA v jej G-kvadruplexovej štruktúre pomocou nízkomolekulových ligandov. Výsledkom takejto interakcie je inhibícia telomerázy a zastavenie zhubnej proliferácie [2].

Naša práca je zameraná na štúdium syntézy nových 3,6,9-trisubstituovaných derivátov akridínu a ich schopnosti interagovať s DNA. Ich syntéza vychádza z našich nadobudnutých poznatkov o spájaní aromatických skeletov Ullmann-Jordanovou reakciou. Kľúčovým krokom našej syntézy bola príprava 3,6-diizotiokyanáto-9-substituovaných akridínov a ich následné využitie v reakciách vedúcich k tiomočovinovým, močovinovým, guanidínovým, imidazolidinovým a tiazolidinovým derivátom.

Nasyntetizované akridínové deriváty boli použité na určenie spôsobu interakcie ligandu s DNA a na stanovenie väzbových konštánt vzniknutých komplexov a taktiež na určenie ich schopnosti inhibovať enzým topoizomerázu. V *in vitro* podmienkach budú stanovené biologické vlastnosti týchto derivátov na vybraných bunkových líniách.

Práca bola finančne podporená agentúrou MŠ SR VEGA (grant č. 1/0672/11, 1/0001/13) a grantovým programom UPJŠ-VVGS (grant č. 40/12-13) a VVGS-PF-2013-78.

[1] Rajagopal Kalirajan, Vivek Kulshrestha, Sundaram Ravi Sankar, Selvaraj Jubie: *Eur. J. Med. Chem. 56*, 217 – 224 (2012)
[2] Maria Ruden, Neelu Puri: *Cancer Treat Rev. 39*, 444 – 456 (2013)

3Po49
KYANOVODÍK V CHEMII FRAGNANCÍ

Karel Zelinka, Jan Šimbera

Lučební závody Draslovka a.s. Kolín, Havlíčkova 605, 28099 Kolín, karel.zelinka@draslovka.cz

Nositeli účinnosti u fragnancí jsou velmi často estery a laktony, které mohou být různě substituované. Strukturně se jedná o látky alifatické, alicyklické i aromatické, které jsou syntetickými analogy přírodních látek, jejichž získávání je složité a nákladné. Jednou z možností substituce těchto esterů je karbonylová skupina v poloze 3. Prekurzorem takto substituovaných esterů mohou být nitrily, které je možné získat bazicky katalyzovanou adicí HCN na odpovídající vinylketon.Takto připravený nitril je poté hydrolyzován a následně esterifikován alkoholem na konečný produkt. V případě přípravy laktonů je možné vyjít také z ketonitrilu, připraveného stejným způsobem. Poté existují dvě reakční cesty – hydrolýza nitrilu na kyselinu a následná redukce ketoskupiny na alkohol následovaná cyklizací na lakton nebo nejprve redukce ketonitrilu a poté hydrolýza a cyklizace vzniklého hydroxynitrilu na finální lakton. Naším cílem je nalézt takový proces, který je možné zavést do průmyslového měřítka. To se nám již u jedné látky podařilo a v současné době se v LZD vyrábí desítky tun ročně tohoto produktu.

Projekt TA03010633 Progresivní udržitelné technologie pro syntézy chemických specialit z oblasti kyanové chemie je řešen s finanční podporou TA ČR.

3Po50
MODIFIKACE FARMAKOFORŮ TRILOBOLIDU

Tomáš Zimmermann, Michal Jurášek a Pavel Drašar

Vysoká škola chemicko technologická, Ústav chemie přírodních látek, Praha 6 Dejvice, Česká Republika

Trilobolid (TB) je seskviterpenový lakton izolovaný z *Laser Trilobum (L.) Borkh*. U této látky, jako i u jiných seskviterpenových laktonů, byla zjištěna schopnost kompetitivně inhibovat Ca^{2+} ATPasovou aktivitu sarco/endoplazmatického retikula[1]. Takto inhibovaná ATPasa přestává pumpovat Ca^{2+} ionty dovnitř endoplazmatického retikula, kde je jejich koncentrace řádově vyšší než v cytoplazmě, a dochází tak k porušení vnitřní homeostázy a následně k apoptóze. TB rovněž vykazuje významné imunostimulační vlastnosti. Spouští produkci NO a interferonu-γ, který se podílí na imunitní odpovědi organismu při virových nákazách[2].

Naše dosavadní práce vedla k přípravě několika derivátů TB. Jeho modifikací se snažíme dosáhnout vyšší polarity a zlepšit jeho cílení do rakovinných buněk. Dále umožnit asociaci molekuly TB s proteiny a zvýšit jeho biologickou aktivitu. Výsledné produkty budou podrobeny testování *in vitro*.

Poděkování: Tato práce byla financována z grantu MSM 6046137305.

[1] [1] D.P. Drew, N. Krichau, K. Reichwald, H.T. Simonsen, Phytochem. Rev., 8 (2009) 581-599.
[2] [2] E. Kmonickova, J. Harmatha, K. Vokac, P. Kostecka, H. Farghali, Z. Zidek, Fitoterapia, 81 (2010) 1213-1219.

POSTERY - SEKCIA 4
VYUČOVANIE A HISTÓRIA CHÉMIE

4Po01
MOTIVAČNÉ PREPOJENIE MINULOSTI A SÚČASNOSTI – DIDAKTICKÝ PRÍKLAD BERGAKADÉMIE A RASTRUJÚCEJ SONDOVACEJ MIKROSKOPIE V NANOTECHNÓLOGII

Ján Goruška[1], Dušan Velič[1] Ján Benko, Daniel Repovský[1]

1Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie

Počiatky vysokého technického školstva na Slovensku sú späté hlavne so vznikom Baníckej akadémie v Banskej Štiavnici. Mária Terézia ju založila v roku 1762 pre stále rastúce potreby vyššieho stupňa vzdelania banských majstrov. Prvou katedrou bola Katedra chémie, mineralógie a metalurgie. Prvým profesorom chémie a mineralógie bol M. J. Jacquin, ktorý tu mal v roku 1764 prvú prednáška z chémie. Nanotechnotógia je vedecký smer, ktorý sa zaoberá skúmaním hmoty na úrovni rozmeru nanometrov. Medzi hlavné techniky, patria Skenovacia tunelová mikroskopia (STM – meranie vodivých povrchov) a Atómová silová mikroskopia (AFM – meranie nevodivých povrchov). Jej autori dostali za ich objavenie Nobelovu cenu. V experimente som na mineráli muskovit zmeral hrúbku vrstvy, ktorú som vytvoril odlúpením. Tieto príklady z minulosti a zo súčasnosti, som sa snažil použiť ako možnú motiváciu pre žiakov stredných škôl. Dôvodom je, že väčšina považuje tento predmet za neatraktívny a zbytočný. K týmto faktom som dopracoval výskumom pomocou dotazníka.

4Po02
HISTORIE A SOUČASNOST CHEMICKÉ OLYMPIÁDY

Marta Klečková[1], Klára Černá[1]

[1]Přírodovědecká fakulta UP v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc, marta.kleckova@upol.cz

Ve školním roce 2013/2014 proběhne 50. ročník chemické olympiády (ChO) [1,2], což ji řadí mezi nejstarší přírodovědné předmětové soutěže v České republice spolu s olympiádou matematickou (63. ročník), fyzikální (55. ročník) a biologickou (48. ročník). Hlavním úkolem ChO je vzbudit zájem žáků již na ZŠ a SŠ o chemii, rozvíjet jejich přirozený talent, vést je k samostatnému a tvořivému myšlení.

Největších změn v uplynulých padesáti letech dosáhly soutěžní úlohy. Zatímco obtížnost úloh nejvyšších kategorií A a E postupně vzrůstá v důsledku rozvoje oboru a také zpětným působením náročnosti mezinárodní ChO, obtížnost úkolů v kategoriích B, C a D klesá s nástupem nových generací žáků, které je potřeba stále více motivovat a lákat ke studiu přírodovědných oborů a neodrazovat je příliš náročnými teoretickými úlohami, ale sestavit je tak, aby byly pro soutěžící zajímavé a poutavé, pokud možno propojené s běžných životem. Celkový počet účastníků chemické olympiády všech věkových kategorií se v posledních letech pohybuje kolem 12 – 13 000 [3].

Úspěšnost českých (resp. do roku 1990 československých) olympioniků na mezinárodní chemické olympiádě (IChO) je stabilně velmi dobrá především díky učitelům chemie, kteří je pro účast v ChO získali. Naši žáci přiváží z této prestižní chemické soutěže cenné medalie (zlaté, stříbrné, bronzové). V letošním roce se koná již 45. ročník IChO v Moskvě [1].

Poděkování za finanční podporu EU projektu OPVK CZ.1.07/2.2.00/15.0324 „Inovace profesní přípravy budoucích učitelů chemie“.

[1] http://web.natur.cuni.cz/cho/index.php [citováno 1. 7. 2013]
[2] P. Holzhauser: Informace k organizační změně Chemické olympiády – Bulletin Chemické Listy 104, 61-77. Česká společnost chemická, 2006
[3] J. Vymětal: Chemické Listy 100, 919-942. Česká společnost chemická, 2006

4Po03
OPTIMALIZACE E-LEARNINGOVÉ PLATFORMY MOODLE PRO VÝUKU CHEMIE

Martin Mastný[1], Jan Horníček[1], Miroslav Šimek[1]

[1]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, 166 28, Praha 6, martin.mastny@vscht.cz

E-learningové metody zažívají v poslední době prudký rozvoj na většině vysokých škol. Je možno říci, že průkopníkem na tomto poli jsou MIT, Stanford University, Harvard University a Berkeley University of California. Co ale zmíněné systémy nepokrývají jsou specifika přípravy materiálů pro výuku chemických oborů – zápis vzorců a rovnic stále zůstává obtížný.

Na VŠCHT Praha vznikl v rámci projektu OPPA „Inovace bakalářského studijního programu Potravinářská a biochemická technologie zavedením prvků e-learningu“ [1] koncept podpory tvorby materiálů pro výuku chemie založený na platformě Moodle [2], který pedagogům velmi usnadňuje přípravu výukových podkladů – textů, elektronických i tištěných testů, slovníků a multimediálních dat. Je tak možno jednoduchým způsobem vkládat vzorce a rovnice z anorganické i organické chemie a připravovat interaktivní materiály. Celý proces probíhá na klientské straně v programech, na které je pedagog zvyklý (Microsoft Word, případně LaTeX). Po uložení změn je materiál automaticky zaslán na serverovou stranu a promítnut do e-learningového kurzu.

Výsledný koncept tak usnadňuje pedagogům tvorbu výukových materiálů a zároveň zpřístupňuje studentům probíranou tématiku v co nejefektivnější a nejpoutavější formě.

[1] http://www.vscht.cz/homepage/fpbt/index/OPPA
[2] http://www.moodle.org

4Po04
INOVACE PODKLADŮ PRO LABORATORNÍ CVIČENÍ Z ORGANICKÉ CHEMIE

Michal Novotný[1], Rostislav Radvan[1], Magdalena Herrmannová[1]

[1]Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta, Katedra chemie, Rokitanského 62, Hradec Králové, Česká republika, michal.novotny@uhk.cz

Organická chemie náleží k základním chemickým oborům zaměřeným na organické molekuly. Základem výuky organické chemie jsou přednášky a semináře, kde studenti získávají velké množství teoretických znalostí. Cílem laboratorních cvičení je propojení těchto získaných vědomostí s reálným průběhem chemických reakcí v praxi.

Inovované podklady určené pro výuku právě Laboratorních cvičení z organické chemie jsou členěny na tři základní části – část obecnou, část pojednávající o hlavních izolačních a čistících metodách v organické chemii a část věnovanou reaktivitě vybraných organických sloučenin. V obecné části jsou shrnuta základní pravidla pro bezpečnou práci v laboratoři a základy první pomoci. Významnou součástí této části je popis běžného laboratorního skla a vybavení. [1] V části zabývající se čistícími a izolačními metodami je věnována pozornost specifickým požadavkům laboratorní techniky organické chemie a jsou zde probrány jednotlivé metody od filtrace až po moderní chromatografii. [2] Všechny metody jsou doplněny o praktické úlohy, na nichž si student získané vědomosti osvojí. V poslední části se nachází přehled reaktivity základních organických sloučenin. Student si na vybraných úlohách prakticky procvičí reakce typů substitucí nukleofilních, substitucí elektrofilních, adicí, eliminací a přesmyků. [3]

Výsledkem je vytvoření přehledného a srozumitelného podkladu pro kompletní výuku Laboratorních cvičení z organické chemie.

Tento příspěvek vznikl s podporou projektu MŠMT OPVK CZ.1.07/2.2.00/28.0118.

[1] Šilhánková A. a kol. Laboratoř organické chemie, VŠCHT, 2000
[2] Hrabálek, A. a kol. Chemická laboratorní technika pro farmaceuty, KAROLINUM, 2007
[3] Hrabálek, A. a kol. Laboratorní cvičení z organické chemie pro farmaceuty, KAROLINUM, 2008

4Po05
POPULARIZACE CHEMIE V RÁMCI PROJEKTU BRAVO NA UNIVERZITĚ PARDUBICE

Patrik Pařík[1], Dagmar Holubcová[2], Petr Bělina[3]

[1]Ústav organické chemie a technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, Patrik.Parik@upce.cz
[2]Katedra biologických a biochemických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Česká republika, Dagmar.Holubcova@upce.cz
[3]Katedra anorganické technologie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, Doubravice 41, 532 10 Pardubice, Česká republika, Petr.Belina@upce.cz

Projekt *Brána vědě(ní) otevřená – BRAVO* realizovaný na Univerzitě Pardubice v období od 1. 6. 2012 do 31. 5. 2014 uskutečňuje sérii akcí zaměřených na popularizaci vědy, výzkumu a odborných činností na naší univerzitě a všech sedmi jejích fakultách. Účelem akcí je podporovat zájem dětí a mládeže o rozmanité vědní obory, provádět populárně-naučné akce komunikující výsledky vědy a výzkumu, pracovat s talentovanými jedinci a podílet se na rozvíjení jejich zájmu o vědu a výzkum, podporovat pedagogy všech stupňů vzdělávání při práci s žáky a studenty a v neposlední řadě organizovat vzdělávání akademických a ostatních pracovníků univerzity v oblasti popularizace a komunikace

vědecko-výzkumných činností. Systematicky je tedy vytvářen komplexní systém popularizace činností a komunikace výsledků vědy a výzkumu Univerzity Pardubice snažící se o maximální interakci se všemi cílovými skupinami. Veškeré informace o projektu jsou k dispozici mj. na adrese http://projekty.upce.cz/bravo/index.html.

Naše fakulta chemicko-technologická je masivně zapojena všech sedmi klíčových aktivit projektu. Z mnoha realizovaných, probíhajících nebo připravovaných akcí můžeme jmenovat Veletrh vědy – vědecko-technický jarmark v kampusu univerzity nebo na Pernštýnském náměstí, sérii road-shows Věda a technika na dvorech škol, diskusní večery Science Café v Divadle 29, sérii workshopů O vědě (ne)vědecky, sérii populárně-naučných přednášek Exempla Trahunt, pravidelné Semináře pro středoškolské učitele chemie, tematické dny otevřených dveří Brána univerzity otevřená, studentskou konferenci Vědění mladým, Noc mladých výzkumníků na Zámku v Pardubicích, Staň se na jeden den studentem FChT nebo účast na Pardubické muzejní noci či na veletrzích v Bratislavě nebo v Brně.

Kolektiv akademických pracovníků a studentů fakulty se podílí na přípravě a realizaci seminářů, přednášek, expozic a kontaktních míst, na kterých představují vývoj a úspěchy v oblasti jejich badatelského zájmu a prezentují výsledky vlastního výzkumu. Nedílnou součástí mnoha akcí je pak zájemcům a návštěvníkům přiblížit kouzlo chemie prostřednictvím jednoduchých a často interaktivních pokusů a experimentů, které jsou vybírány s ohledem na snadnou a bezpečnou realizaci na nižších stupních vzdělávání popřípadě i v domácích podmínkách.

Příspěvek byl realizován za finanční podpory MŠMT ČR v rámci projektu OP VK „Brána vědě(ní) otevřená“ č. CZ.1.07/2.3.00/35.0024.

4Po06
VÝBRANÁ TÉMATA PRO VÝUKU CHEMIE – SÉRIE VÝUKOVÝCH MATERIÁLŮ PRO BUDOUCÍ UČITELE CHEMIE

Jana Prášilová[1], Marta Klečková[1], Jiří Kameníček[1]

[1]*Katedra anorganické chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. listopadu 12, 771 46, Olomouc, j.prasilova@upol.cz, marta.kleckova@upol.cz, jiri.kamenicek@upol.cz*

Každodenní příprava učitele na výuku přírodovědných předmětů je časově velmi náročná (pomůcky, demonstrační experimenty, PP prezentace aj.). Především pro začínající učitele jsou často první měsíce ve škole stresující a obtížně zvladatelné, vezmeme-li v úvahu, že je permanentně zatěžují administrativní úkoly.

V rámci zkvalitnění teoretické přípravy budoucích učitelů chemie na Přírodovědecké fakultě v Univerzity Palackého v Olomouci jsou pro studenty učitelských oborů připravovány výukové materiály rozšiřující a inovující stávající učivo středoškolské chemie [1]. Hlavní myšlenkou bylo vybrat témata napříč obory chemie, o jejichž zpracování mají učitelé chemie ve školské praxi zájem. Jedná se především o problematické partie učiva (např. chemická vazba, názvosloví, galvanické články), poznatky ze stále se rozvíjejících oblastí biochemie (metabolismus, DNA, tkáňové inženýrství aj.) i učivo chybějící v učebnicích chemie (biotechnologie, nanotechnologie).

V rámci EU projektu „Učitel chemie“ byly vytvořeny studijní materiály: Vybraná témata pro výuku chemie 1 - 3 [2]; publikace Chemická terminologie v angličtině – názvosloví anorganických látek, bezpečnost v laboratoři a její vybavení; skripta zaměřená na chemické experimenty a studijní text věnující se problematice průmyslových výrob vybraných chemických látek. U většiny výukových materiálů jsou přiloženy i PowerPointové prezentace. Všechny zpracované materiály jsou učitelům k dispozici na CD v „otevřené variantě“ umožňující učitelům s nimi dále pracovat.

Příspěvek vznikl za finanční podpory EU projektu OPVK CZ.1.07/2.2.00/15.0324 „Inovace profesní přípravy budoucích učitelů chemie“.

[1] Studijní materiály pro VŠ studenty budoucí učitele chemie. *Inovace profesní přípravy budoucích učitelů chemie* [online]. Marta Klečková a kol., 2011, 15. 2. 2013 [cit. 2013-07-10]. Dostupné z: http://ucitelchemie.upol.cz/materialy.html

[2] ŠVANDOVÁ, V., T. ŠTOSOVÁ, J. KAMENÍČEK, J. PRÁŠILOVÁ, J. HUSÁREK, Z. ŠINDELÁŘ a M. KLEČKOVÁ. *Vybraná témata pro výuku chemie: 1. část*. 1. vyd. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2012. Skripta, z. č. 2012/745. ISBN 978-80-244-3353-0

4Po07
ZAVEDENÍ ÚLOHY SPEKTROFOTOMETRICKÉ STANOVENÍ AKTIVITY PANKREATICKÉ LIPÁZY, STANOVENÍ OPTIMÁLNÍHO PH

Šárka Štěpánková[1]

[1] *Katedra biologických a biochmeických věd, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice, sarka.stepankova@upce.cz*

Předmět Laboratoř z biochemie je jedním z důležitých předmětů vyučovaných ve studijních oborech Klinická biologie a chemie a Zdravotní laborant na Fakultě chemicko-technologické Univerzity Pardubice a jeho inovace je žádoucí. Cílem je zavedení nové laboratorní úlohy - Spektrofotometrické stanovení aktivity pankreatické lipázy, stanovení optimálního pH.

Lipázy (triacylglycerol acylhydrolázy, EC 3.1.1.3.) jsou glykoproteiny s molekulovou hmotností 47 000 daltonů. Jsou definovány jako hydrolázy, které katalyzují štěpení triacylglycerolů na diacylglyceroly s následným vznikem monoacylglycerolů a mastných kyselin. Spolu s α-amylázou je pankreatická lipáza již po mnoho let nejdůležitějším biochemickým parametrem v diferenciální diagnostice onemocnění pankreatu.

Stanovení lipolytické aktivity s využitím p-nitrofenylpalmitátu jako substrátu je založeno na schopnosti lipolytických enzymů štěpit tento substrát za vzniku žlutě zbarveného produktu p-nitrofenolu, který je stanoven spektrofotometricky při 410 nm. Aktivita lipázy je následně stanovena pomocí kalibrační přímky pro p-nitrofenol (tj. je vyjádřena jako množství p-nitrofenolu, které se uvolnilo z p-nitrofenylpalmitátu působením enzymu).

Aktivita enzymů závisí na koncentraci vodíkových iontů (pH) prostředí. U každého enzymu je možno stanovit hodnotu pH, při níž je jeho aktivita nejvyšší (tzv. pH optimum).

Práce byla řešena za finanční podpory FRVŠ 300/2013/B1.

4Po08
INOVACE BAKALÁŘSKÉHO STUDIJNÍHO OBORU APLIKOVANÁ CHEMIE CZ.1.07/2.2.00/15.0247

Petr Suchomel[1], Libor Kvítek[1], Tomáš Sýkora[2], Taťjana Nevěčná[1]

[1]*Katedra fyzikální chemie, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci, 17. Listopadu 12, 771 46 Olomouc, Česká republika, petr.suchomel@upol.cz*
[2]*Okresní hospodářská komora Olomouc, Opletalova 1, 772 00 Olomouc, Česká republika*

Projekt má za cíl zásadní inovaci bakalářského studijního oboru Aplikovaná chemie zvyšující jazykovou připravenost a dovednosti studentů při práci s IT a umožňující výběr odborného zaměření prostřednictvím modulové skladby výuky. Realizace cíle je zabezpečena klíčovými aktivitami typu inovace stávajících a vytvoření nových předmětů z oblasti výuky cizího jazyka, předmětů zaměřených na znalost IT i vysokou odbornost absolventa. Důležitou klíčovou aktivitu představují nově sestavené výukové moduly, umožňující odbornou specializaci cílové skupině vysokoškolských studentů tohoto bakalářského studijního oboru - zaměření do oblasti ekonomiky ve spojení s chemickou odborností resp. zaměření na materiálové technologie a nanotechnologie. Inovace výuky je spojena s rozšířením nabídky elektronických učebních textů a s rozvojem e-learningových metod. Celý projekt tak přispívá k rozvoji cílů znalostní ekonomiky v oblasti střední a severní Moravy postižené vysokou nezaměstnaností.

Projekt Inovace bakalářského studijního oboru aplikovaná chemie CZ.1.07/2.2.00/15.0247 je spolufinancován Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

4Po09
VYUŽITIE EFEKTNÝCH POKUSOV VO VÝUKE FYZIKÁLNEJ CHÉMIE

Alena Uhríková[1], Rostislav Radvan[1], Magdalena Herrmannová[1]

[1] *Univerzita Hradec Králové, Přírodovědecká fakulta, Katedra chémie, Rokitanského 62, Hradec Králové, Česká republika, alena.uhrikova@uhk.cz*

Fyzikálna chémia je odvetvie chémie, ktoré vyvíja a popisuje zákonitosti chémie fyzikálnymi postupmi a matematickým jazykom. [1] Je známe, že v súčasnej dobe klesá počet uchádzačov, ktorí sa zaujímajú o prírodovedné predmety. Fyzikálna chémia ako predmet na školách je pre študentov málo atraktívna, nielen

kvôli svojej náročnosti ale taktiež kvôli nutnosti spájať vedomosti z rôznych predmetov (chémia, matematika, fyzika). Našou snahou v rámci projektu je inovácia študijných materiálov, aby sa štúdium chémie nezakladalo len na teoretických vedomostiach ale taktiež na praktických skúsenostiach. Chceme dosiahnuť aby študenti získali pozitívny prístup k práci a to môžeme dosiahnúť iba ak zaradíme do výuky experimenty, ktoré ich nejakou formou budú zaujímať. Preto sme sa rozhodli aplikovať do výuky fyzikálnej chémie niekoľko efektných pokusov, ktoré úzko súvisia s princípmi fyzikálnej chémie a rovnako tak je možné ich realizavať aj na hodinách chémie na základnej a strednej škole. Absolventi našej školy, teda budúci učitelia, si tak odnesú cenné informácie, ktoré budú môcť aplikovať vo svojej učitelskej praxi.

Cieľom tohto príspevku je znázornenie jednoduchých efektných pokusov [2,3], ktoré uplatňujú zákony fyzikálnej chémie.

Tento príspevok vznikol s podporou projektu MŠMT OPVK CZ.1.07/2.2.00/28.0118.

[1] Peter Atkins, Julio de Paula: Fyzikální chemie, VŠCHT (2013)
[2] Ján Bílek: Efektní pokusy anorganické chemie, Strážice (2011)
[3] Anna Michalíková, MTF STU, Trnava (http://www.prirodnejavy.eu/pokusy/)

POSTERY - SEKCIA 5
POTRAVINÁRSTVO, ŽIVOTNÉ PROSTREDIE A BIOTECHNOLÓGIA

5Po01
POLYFOSFÁTKINÁZY A ICH APLIKÁCIE V BIOTECHNOLÓGII

Lucia Achbergerová[1,2], Jozef Nahálka[1,2]

[1]*Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Centrum glykomiky, Dúbravská cesta 9, 845 38 Bratislava, Slovakia; chemlucy@savba.sk*
[2]*Slovenská akadémia vied, Chemický ústav, Centrum excelencie pre bielo-zelenú biotechnológiu, Trieda A. Hlinku 2, 949 76 Nitra, Slovakia*

Polyfosfátkinázy (Ppk) katalyzujú polymerizáciu a degradáciu polyfosfátového vlákna, lineárnej molekuly pozostávajúcej z desiatok až stoviek fosfátových zvyškov pospájaných makroergickými väzbami. Výsledkom tohto procesu je produkcia alebo spotrebovanie energie vo forme ATP [1].

Tieto poznatky viedli k vzniku ATP-regeneračného systému, v ktorom je reakčná zmes tvorená ADP a polyfosfátom preháňaná cez kolónu s imobilizovanou Ppk. ATP vzniknuté v tejto reakcii sa použije ako zdroj energie v nasledovnej reakcii [1].

Pripraviť čistý solubilný enzým nie je jednoduché ani lacné. V našej práci sme pripravili rekombinantný enzým Ppk fúzovaný s celulóza väzobnou doménou (*cellulose binding domain* - CBD). V našom prípade CBD slúži ako agregačný modul, t.j. znižuje rozpustnosť enzýmu a zvyšuje schopnosť enzýmu fyziologicky agregovať. Agregovaný enzým vytvára v bunkách *Escherichia coli* inklúzne telieska (*inclusion bodies* -IB). IB sa dajú z bunky ľahko a lacno izolovať, pričom sú veľkou zásobárňou zväčša čistého proteínu. CBD zároveň zvyšuje aktivitu enzýmu v IB [2].

Z toho dôvodu majú nami pripravené Ppk veľkú perspektívu pre využitie v priemysle ako bioenergetický modul, ktorý bude generovať energiu v podobe ATP. Tá sa môže využiť v spriahnutej reakcii na prípravu ľubovoľného produktu. Naša práca študuje Ppk od ich evolučných vzťahov cez prípravu a biochemickú charakterizáciu až po ich imobilizácie.

Táto publikácia vznikla vďaka podpore v rámci operačného programu Výskum a vývoj pre projekt: Centrum excelentnosti pre bielo-zelenú biotechnológiu, ITMS 26220120054, spolufinancovaný zo zdrojov Európskeho fondu regionálneho rozvoja.

[1] Achbergerová, L., and Nahálka, J., 2011. Polyphosphate - an ancient energy source and active metabolic regulator. Microbial Cell Factories *10*, 63.
[2] Nahálka, J., and Nidetzky, B., 2007. Fusion to a pull-down domain: a novel approach of producing Trigonopsis variabilis D-amino acid oxidase as insoluble enzyme aggregates. Biotechnol Bioeng 97:454-461.

5Po02
VPLYV PODMIENOK NA CITLIVOSŤ MIKROORGANIZMOV KU ŽIARENIU

Jaroslav Červenák[1], Viliam Múčka[1], Václav Čuba[1]

[1]*Katedra jaderné chemie, FJFI, ČVUT v Praze, Břehová 7, 115 19 Praha 1, ČR*

Východiskom práce je predpoklad, že OH radikály, jeden z hlavných produktov rádiolýzy vody, hrajú jednu z najdôležitejších úloh pri poškodení buniek, ktoré sú vystavené ionizujúcemu žiareniu. Preto použitie vychytávačov týchto radikálov by malo v ožarovanej suspenzii spôsobiť zníženie radiačnej citlivosti použitých mikroorganizmov (kvasinka *Saccharomyces cerevisiae*, haploidný kmeň, typ *a*, DBM 272; baktéria *Eschericha coli*, DBM 3125).

Zdrojom gama žiarenia bol nuklid ^{60}Co a zdrojom UV žiarenia bola nízkotlaková ortuťová. Zo zisteného počtu preživších buniek v ožiarenej a neožiarenej suspenzii boli zostrojené a diskutované závislosti veličiny ξ (podiel prirodzených logaritmov frakcie buniek preživších v roztoku s nulovou koncentráciou vychtávača a frakcie buniek preživších v suspenzii s vychytávačom) na dávke pre všetky vychytávače pre *E. coli* a *Saccharomyces cerevisiae* ožiarené gama a UV žiarením.

Na základe týchto závislostí bolo možné konštatovať, že 1. zatiaľ čo mechanizmus ochrany bakteriálnych buniek je pravdepodobne rovnaký pre všetky študované vychytávače, pre kvasinky je zrejme tento mechanizmus iný pre alkoholické a nealkoholický vychytávač a 2. radiačná citlivosť baktérií je v prítomnosti všetkých študovaných vychytávačov výrazne vyššia ako radiačná citlivosť kvasiniek.

Práca bola podporená z projektu GA ČR 13-28721S, jeho čiastkovým projektom 302-120010D000 a študentskou grantovou súťažou ČVUT SGS 11/163/OHK4/3T/14.

5Po03
DECORATION OF IRON-OXIDE NANOPARTICLES BY BIOMOLECULES.

I.Capek[1)], P.Capek[2)] and Z.Hloušková[1)].

Polymer Institute[1)] and Chemical Institute[2)], Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta, Bratislava, Slovakia

For the discussed biomedical applications, the vast number of known magnetic materials is strongly reduced by the demands of biocompatibility including: (i) non-toxicity; (ii) a sufficient chemical stability in bio-environment; (iii) an appropriate circulation time in the blood; and (iv) a harmless biodegradability. As a consequence investigations mainly concentrate on magnetic iron oxides Fe_3O_4 (magnetite) and γ-Fe_2O_3 (maghemite). The quality of the magnetic nanoparticles (MNPs) required for a specific biomedical application is strongly related to their structural and magnetic properties. For most biomedical applications, the particles should have intrinsically a large saturation magnetization allowing for large magnetic moments despite the small particle volumes. Due to the biocompatibility constraint, the choice of magnetic substances is, at least at the moment, concentrated on the strong magnetic iron oxides: magnetite and maghemite. In the presence of various stabilizers we can prepared core-shell nanoparticles with different coatings, such as 2,3-dimercaptosuccinic acid (DMSA)-, phosphonoacetic-, dextran (Dx)- and citric acid (CA)-coated samples (Fig. 1). The colloidal stability and particle size is also function of costabilizers (or solvents, such as acetone, acetonitrile,..) which passivate the particle size.

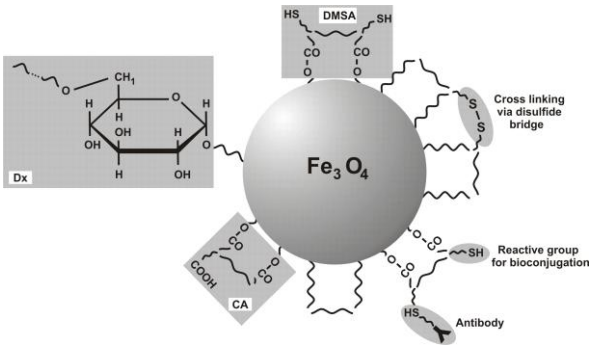


Figure 1. Schematic picture of DMSA, Dx and CA - coated water-soluble Fe_3O_4 passivated by solvents such as acetone.

MNPs modified with dextran or oleic acid, and functionalized with a polymer or liposome, and/or further conjugated with biomolecules such as DNA aptamers, oligopeptides, viruses and enzymes and an anticancer therapeutic drug can improve the colloidal stability of the magnetic fluid, affinity for the carcinoma cell, or confer a tumor-specific targeting ability. These modified magnetic particles show an improved adsorption and accumulation in the area of a tumor, and also have an improved heating efficiency on exposure to an AC magnetic field. Magnetic nanoparticles have been used, for example, for magnetic cell separation or magnetic resonance imaging (MRI). The development of biocompatible nanosized drug delivery systems for specific targeting of

therapeutics is the focus of medical research, especially for the treatment of cancer and diseases of the vascular system. Magnetic iron oxide nanoparticles, bound to a chemotherapeutic agent, can be inserted into a tumour by an external magnetic field (magnetic drug targeting). Complete tumor remission could be achieved. An important advantage of these carriers is the possibility for detecting these nanoparticles after treatment with common imaging techniques (i.e. x-ray-tomography, magnetorelaxometry, magnetic resonance imaging), which can be correlated to histology.

Acknowledgements: This research was supported by the APVV-0125-11 project.

5Po04
ELEKTROCHEMICKÉ ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

Barbora Horňáková[1], Libor Dušek[1], Evelína Erbanová[1]

[1]*Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 95, Pardubice 53210, e-mail: barbora.hornakova@student.upce.cz, libor.dusek@upce.cz, evelina.erbanova@upce.cz*

Cílem projektu je rozšířit praktickou laboratorní výuku studentů bakalářského a magisterského studia na Ústavu environmentálního a chemického inženýrství o elektrochemické sanační a dekontaminační procesy vhodné pro čištění biologicky obtížně odbouratelných polutantů, vyskytujících se v průmyslových odpadních a procesních vodách. Projekt přinese rozšíření a inovaci současné laboratorní výuky studentů. Za tímto účelem byla sestavena demonstrační modulární víceúčelová elektrochemická aparatura s ovládacím a řídícím příslušenstvím.

V rámci projektu byla za použití této aparatury studována katalyzovaná elektrosyntéza peroxidu vodíku pomocí rozkladu elektrolytu za přítomnosti vhodného katalyzátoru. Byly zjišťovány optimální podmínky syntézy na více druzích elektrod a katalyzátorů. Dále byla studována i účinnost odbourávání komerčních antrachinonových barviv z roztoku v elektrochemické cele pomocí Fentonovy reakce.

Poděkování: *Tento projekt je financován za podpory FRVŠ /2013/423.*

5Po05
FOTOSTABILITA CIS IZOMERŮ LUTEINU

Barbora Hrvolová[1, 2], Jiří Kalina[1]

[1]*Ostravská univerzita v Ostravě, Dvořákova 7, 701 03, Ostrava, B.Hrvolova@seznam.cz*
[2]*Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, 17.listopadu 15, 708 33, Ostrava*

Lutein řadíme ke karotenoidům, konkrétně ke xantofylům, významným pigmentům mnoha biologických systémů, ve kterých plní různorodé funkce. Nalézt jej můžeme jak v tkáních živočišného tak rostlinného původu. Předmětem mnoha studií se stal díky svým antioxidačním schopnostem, a to především kvůli svému preventivnímu účinku proti stařeckému degenerativnímu onemocnění makuly (AMD) [1]. Lutein a karotenoidy obecně mohou díky své struktuře vytvářet geometrické izomery, tzv. stereoizomery, *cis* a *trans*. Protože se tyto konfigurace liší svou strukturou lze u nich předpokládat i rozdílné fyzikálně-chemické vlastnosti [2]. Po dlouhou dobu se předpokládalo, že v biologických systémech se vysoce reaktivní *cis* izomery přirozeně vůbec nevyskytují. Toto tvrzení bylo však vyvráceno jejich přímou izolací [3]. *Cis* izomery mohou díky svým vlastnostem poskytovat vyšší antioxidační účinek. *All-trans* forma je obecně považována za stabilnější než *cis*-forma. Pro případné využití potencionálně vyšších antioxidačních vlastností *cis* izomerů luteinu jsme se zabývali jejich fotostabilitou. U *cis* izomerů jsme ověřili jejich fotostabilitu při ozářenosti 2000 μmo l. m^{-2} . s^{-1}. *Cis* izomery byly za těchto podmínek shledány jako stabilní.

Příspěvek byl vypracován v rámci projektu Institut environmentálních technologií, reg. č. CZ.1.05/2.1.00/03.0100 podporovaného Operačním programem Výzkum a vývoj pro Inovace, financovaného ze strukturálních fondů EU a ze státního rozpočtu ČR. Dále byl příspěvek podpořen projektem SGS SP2013/35 „ Biomedicínské inženýrské systémy IX“.

[1] ZHAO L., SWEET B. V.: Lutein and zeaxanthin for macular degeneration, Am J Health Syst Pharm, 65, 13, (2008) 1232-1238
[2] SHIEBER A., CARLE R.: Occurrence of carotenoid cis-isomers in food: Technological, analytical, and nutritional implications, Trends in Food Science & Technology, 16, (2005) 416–422
[3] STAHL W., SUNDQUIST A. R., HANUSH M., SCHWARTZ W., SIES H.: Separation of beta-carotene and lycopene geometrical isomers in biological samples, Clin. Chem., 39, (1993) 810–814

5Po06
IMMOBILIZATION OF LACCASE ON MAGNETIC CARRIERS AND ITS BIOTECHNOLOGICAL APLICATION

Miroslav Jořenek[1] and Ludmila Zajoncová[1]

[1]*Department of Biochemistry, Faculty of Science, Palacky University, Šlechtitelů 11, 783 71 Olomouc, Czech Republic, MiraCRXJorenek@seznam.cz*

Oxidizers such as periodate or chromate are very common in biotechnological applications, however they represent big burden on the environment. The use of enzymatic reactions, instead of chemical one, allows this burden to be reduce. Laccase is an interesting alternative because of its broad substrate specificity. Substrates of laccase are a wide variety of phenolic and nonphenolic substances [1].

This work is focused mainly on laccase obtained from the fungus *Trametes versicolor*. Magnetic materials were used as a carrier for immobilization. The activity of free and immobilized enzyme was determined spectrophotometrically using the substrate metol. Because immobilization did not get to significantly improve or worsen attributes of the enzyme, advantage of immobilization remains a possibility for repeated use of the enzyme and easy handling of the enzyme, if magnetic materials are used.

As biotechnology applications enzymatic decolorization of various dye solutions used mainly in the textile industry were performed. These dyes were decolorized by immobilized laccase on magnetic micro- and nanoparticles and were compared with the adsorption of dyes on these magnetic carriers. Laccase was able to decolorize well some colors. The decolorization by the immobilized enzyme was similar and was also caused by partial adsorption of the dye carrier.

Tato práce byla podpořena vnitřním grantem Univerzity Palackého PrF_2013_037.

[1] Singh G., Bhalla A., Kaur P., Capalash N., Sharma P.: Rev. Environ. Sci. Biotechnol. *10*, 309 (2011).

5Po07
RETENCE CU(II) A CD(II) POMOCÍ OXYHUMOLITU Z VODNÝCH ROZTOKŮ OBSAHUJÍCÍCH TAKÉ FOSFÁTY

Hana Kohutová[1], Bruno Kostura[1]

[1]*VŠB-Technická univerzita Ostrava, 17. listopadu 15,708 33 Ostrava- Poruba, ČR, bruno.kostura@vsb.cz*

Oxyhumolit (OX) je znám jako sorbent iontů těžkých kovů (TK). Naše dřívější výzkumy ukázaly, že sorbuje v omezené míře i fosfáty [1]. V této práci byly nejprve samostatně posuzovány faktory ovlivňující adsorpci Cu(II) a Cd(II) z vodného roztoku obsahujícího i fosfát na OX, dále byla studována sorpční účinnost OX vůči Cu(II) a Cd(II) ve vzájemných směsích v různých poměrech. Množství Cu(II) sorbované oxyhumolitem lineárně roste s rostoucím pH, zatímco adsorpce fosfátů je konstantní a nezávislá na pH. Stejný trend byl pozorován v systému Cd(II) + fosfát. Výsledky ukazují, že sorpce TK a fosfátů jsou dva na sobě nezávislé procesy probíhající na různých aktivních místech OX. Adsorpční účinnost OX pro Cu(II) byla 94%, pro Cd(II) 64% a pro fosfát v obou případech 13% při pH = 3,7. Podobný trend byl pozorován i v případě společných roztoků Cu(II) a Cd(II) s molárním poměrem 1:1 a hmotnostním poměrem 1:1. Toto zjištění je v dobré shodě s prací [2]. V případě samostatných roztoků TK i jejich ekvimolární směsi bylo adsorbované množství Cu(II) a Cd(II) v mg/g přibližně stejné. To ukazuje, že Cu(II) i Cd(II) se sorbují na stejná aktivní místa povrchu OX. Ionty kovů s větší afinitou vůči OX jsou pak úspěšnější v obsazování povrchově aktivních míst [3].

Práce byla realizována díky finanční podpoře projektů specifického výzkumu SP2013/64 - Specifický výzkum v metalurgickém, materiálovém a procesním inženýrství a SP2013/37 - Optimalizace chemických procesů vedoucích k zhodnocení průmyslových odpadů při jejich sanaci .

[1] Kohutová, H., Kostura, B. and Kukutschová, J.: Oxyhumolite as a sorbent of Cu^{II} from phosphate-containing solutions, ChemPlusChem (2012), doi: 10.1002/cplu.201200151.

[2] Madronová L., Kozler J., Čežíková J., Novák J., Janoš P.: Humic acids from coal of the North-Bohemia coal field q III. Metal-binding properties of humic acids - measurements in a column arrangement, Reactive & Functional Polymers, Vol. 47 (2001), p. 119-123.

[3] Čežíková J., Kozler J., Madronová L., Novák J., Janoš P.: Humic acids from coals of the North-Bohemian coal field q II. Metal-binding capacity under static conditions, Reactive & Functional

Polymers, Vol. 47 (2001), p. 111-118.

5Po08
OXIME ACETYLCHOLINESTERASE REACTIVATORS WITH 3-OXAPENT-1,5-DIYL LINKER – SYNTHESIS AND *IN VITRO* EVALUATION

Musilek, K.[1-3]; Kasparek, A.[1]; Kunes, M.3, Horova, A.[1]; Herman, D.[1]; Krenkova, Z.[1]; Jun, D.[1,3]; Kuca, K.[1,3]

[1] University of Defence, Faculty of Military Health Sciences, Department of Toxicology and Centre of Advanced Studies, Trebesska 1575, 500 01 Hradec Kralove, Czech Republic
[2] University of Hradec Kralove, Faculty of Science, Department of Chemistry, Rokitanskeho 62, 50003 Hradec Kralove, Czech Republic
[3] University Hospital, Sokolska 581, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

The reactivators of cholinesterases (AChE, EC 3.1.1.7; BChE EC 3.1.1.8) are crucial components in the treatment of intoxications caused by organophosphates (OP) such as nerve agents and pesticides [1]. These OP inhibitors covalently bind to active site of mentioned enzyme and irreversibly inhibit its activity. The reactivator breaks the inhibitor-enzyme covalent bond and restores its activity. Unfortunately, there is no reactivator applicable for every type of OP inhibitor [2].

Formerly, bisquaternary mono-oxime AChE reactivators were recommended against organophosphate poisoning [3]. The series of bisquaternary molecules was prepared (Fig. 1) and evaluated on human erythrocyte AChE or human plasmatic BChE inhibited by different OP (dichlorvos, paraoxon, sarin, VX) *in vitro*. The method set up excluded the excess of OP within the measurement. The results showed that some prepared compounds were able to effectively counteract OP inhibition *in vitro* at both tested concentrations (100 and 10 μM).

This work was supported by the long term development plan of the Faculty of Military Health Sciences and University hospital (Hradec Kralove, Czech Republic)

5Po09
SROVNÁNÍ ÚROVNĚ ZNEČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD NA ZÁKLADĚ POROVNÁNÍ UKAZATELŮ BSK_5 A $CHSK_{CR}$

Jana Martinková[1], Tomáš Weidlich[1], Petr Mikulášek[1]

[1]Univerzita Pardubice, Studentská 95, Pardubice 53210, jana.martan@email.cz

Cílem projektu je vybavení Ústavu environmentálního a chemického inženýrství zařízením umožňujícím stanovení biologické spotřeby kyslíku (BSK_5) ve vzorcích dle platných norem (ČSN EN 1899-1,2/A).

Po zakoupení a instalaci navrhovaného zařízení byla vytvořena zcela nová laboratorní úloha s názvem Srovnání úrovně znečištění odpadních vod na základě porovnání ukazatelů BSK_5 a $CHSK_{Cr}$.

Uvedené zařízení umožní studentům praktické seznámení s problematikou stanovování BSK_5. Cílovou skupinou projektu jsou studenti 1. a 2. ročníku navazujícího magisterského studia a dále studenti bakalářského stupně studia, kteří se s navrhovanou problematikou praktického stanovování BSK_5 seznámí při řešení bakalářské práce.

Poděkování: Tento projekt byl financován za podpory FRVŠ/2013/422.

5Po10
STANOVENÍ MOLEKULOVÝCH HMOTNOSTÍ KERATINOVÝCH HYDROLYZÁTŮ

Pavel Mokrejš[1,2], Ondřej Krejčí[1], Svatopluk Sukop[3]

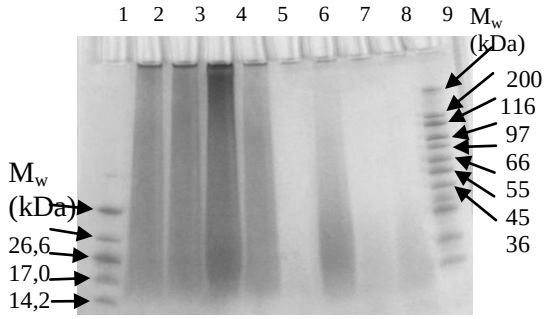
[1]Univerzita T. Bati, Fakulta technologická, Ústav inženýrství polymerů, nám. TGM 275, 762 72 Zlín, mokrejs@ft.utb.cz; okrejci@ft.utb.cz
[2]Univerzita T. Bati, Univerzitní institut, Cenrtrum polymerních systémů, Nad Ovčírnou 3685, 760 01 Zlin
[3]Univerzita T. Bati, Fakulta technologická, Ústav chemie, nám. TGM 275, 762 72 Zlín, sukop@ft.utb.cz

Přípravou keratinových hydrolyzátů alkalicko-enzymovou hydrolýzou jsme se zabývali v našich předchozích publikacích [1-4]. Využití hydrolyzátů v praxi vyžaduje znalosti o jejich složení, tepelné stabilitě a molekulové hmotnosti.

Cílem příspěvku je stanovit u keratinových hydrolyzátů (připravených z ovčí vlny) molekulovou hmotnost. Molekulová hmotnost byla stanovena gelovou elektroforesou (SDS-PAGE). Volbou podmínek při hydrolýze lze připravit hydrolyzáty s převažujícím podílem nízko-molekulárních frakcí (M_w<10 kDa),

středně-molekulárních frakcí (M_w≈10-50 kDa) či vysoko-molekulárních frakcí (M_w>70 kDa). Optimální podmínky přípravy keratinového hydrolyzátu jsou následující: v 1. stupni hydrolýzy působit na vlnu 0,6 % KOH 48 h při 90 ^oC, ve 2. stupni hydrolýzy přidat 1 % (w/w) proteolytického enzymu Savinase 6.0T a míchat 24 h při 40 ^oC. Za těchto podmínek je účinnost rozkladu 63 % a připraví se hydrolyzát s obsahem 11,5 % N, 14,9 % popelovin, 2,58 % síry s vysokým podílem středně- a vysoko-molekulárních frakcí (obr. 1, stopa 4), který je kvalitativně srovnatelný s technickou želatinou.

Ke snížení obsahu popelovin v hydrolyzátech, které je pro některé aplikace nezbytné, lze využít např. dialýzu nebo iontoměniče [5]. Dialýzou keratinových hydrolyzátů jsme se zabývali v našem předchozím příspěvku [6]. Keratinový hydrolyzát lze využít např. pro výrobu obalových materiálů (filmů, povlaků, enkapsulátů).



Obr. 1 SDS-PAGE elektroforegram: stopa 1=nízkomolekulární standard, 4=keratinový hydrolyzát připravený dle optimálních podmínek, 2-3 a 5-9=další keratinové hydrolyzáty, 10= vysokomolekulární standard

Tento článek byl vytvořen za podpory Operačního programu Výzkum a vývoj pro inovace, jenž je spolufinancován Evropským fondem regionálního rozvoje (ERDF) a státním rozpočtem ČR, v rámci projektu Centrum polymerních systémů (reg. číslo: CZ.1.05/2.1.00/03.0111).

[1] P. Mokrejs, O. Krejci, P. Svoboda, V. Vasek: Rasayan J. Chem., 4, 728 (2011).
[2] P. Mokrejs, O. Krejci, P. Svoboda: Oriental J. Chem., 27, 1303 (2011).
[3] P. Mokrejs, J. Hrncirik, D. Janacova, V. Vasek, P. Svoboda: Waste Manage. Res., 29, 260 (2011).
[4] P. Mokrejs, J. Hrncirik, D. Janacova, P. Svoboda: Asian J. Chem., 24, 1489 (2012).
[5] J.A. Arnesen, A. Gildberg: Bioresour. Technol., 98, 53 (2007).
[6] O. Krejci, P. Mokrejs: Waste Forum, 4, 216 (2012).

5Po11
ODSTRAŇOVÁNÍ CHROMANŮ Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Michal Němeček, Helena Parschová, Petra Šlapáková

Ústav energetiky, VŠCHT Praha Technická 5, 166 28 Praha 6, tel. 22044 3126, nemeceki@vscht.cz

Chrom a jeho sloučeniny [1] mají široké využití v průmyslu. Toxicita sloučenin chromu závisí na jejich oxidačním stavu. Kovový (elementární) chrom a jeho trojmocné sloučeniny jsou prakticky netoxické. Naproti tomu všechny šestimocné sloučeniny chromu (chromany) jsou mutagenní a karcinogenní. Podle vyhlášky [2], která stanovuje hygienické požadavky na pitnou a teplou vodu a četnost a rozsah kontroly pitné vody, je nejvyšší mezní hodnota koncentrace Cr v pitné vodě 50 $\mu g.l^{-1}$.

K sorpci chromanů byly v této práci použity ionexy Lewatit MP 64 (dimethylaminová a trimethylamoniová funkční skupina) a Purolite S 110 (aminomethylglucitolová funkční skupina). S těmito ionexy byly provedeny vsádkové a kolonové experimenty. Sledovány byly vlivy specifického kolonového zatížení, hodnoty pH vstupního roztoku a doprovodných iontů na účinnost sorpce. Dále byla zjišťována optimální dávka regeneračního činidla. Kolonové experimenty byly z důvodu simulace reálných podmínek provedeny s roztoky Cr^{VI} připravenými z vodovodní vody.

Zjištěné optimální pH pro sorpci chromanů na těchto ionexech bylo 3-4. Největší záporný vliv na sorpci chromanů měly doprovodné SO_4^{2-} ionty. Na ionexu Purolite S 110 pravděpodobně docházelo k redukci Cr^{VI} na Cr^{III} aminomethylglucitolovou funkční skupinou, což se projevilo zeleným zabarvením nasyceného ionexu.

Tato práce byla financována z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2013)

[1] Pavel Pitter: Hydrochemie, Vydavatelství VŠCHT Praha, (2009)
[2] 252/2004 Sb., Vyhláška ministerstva zdravotnictví ze dne 22. 4. 2004.

5Po12
VERIFICATION OF THE NORM TV 75 7536 (CONTENT OF HUMIC SUBSTANCES IN WATER) BY SOLUTIONS OF FULVIC AND HUMIC ACIDS

František Novák[1], Martina Šestauberová[1], Miroslav Krtička[2]

[1]Biology Centre AS CR, v.v.i., Na Sádkách 7, 370 05 České Budějovice, Czech Republic, novakf@upb.cas.cz; [2]Forestry Game Manag. Research Institute, 156 04 Prague 5 – Zbraslav, Czech Republic

Humic substances (HS) isolated according the IHSS methods [1] from samples, collected on the Czech and Saxony side of Ore Mts., and their modifications were used for verification of the method for determination of HS content in waters. The samples were used as follows: fulvic acids (FA) from peaty creek in Saxony (D1, DR), peat FA (PFA), nitrated peat FA (PNFA), Leonardite fulvic (LFA) and humic acids (LHA) and nitrated lignite FA (LGFA).

Standard solutions were prepared by dissolving of 20 or 40 mg of lyophilized HS in 600 ml of distilled water (i.e. 33 mg/l or 67 mg/l). Concentration of HS in these solutions was then determined by extraction into *n*-pentanol by the Norm 75 7536 [2].

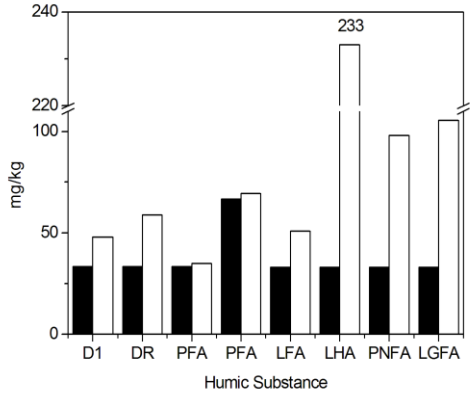


Fig. 1. Comparison of real HS concentration (black bars) with concentration determined by the Norm TNV 75 7536 (white bars).

Results have shown (Fig. 1), that determination of humic substances by the Norm 75 7536 using an empirical coefficient for absorbances conversion to HS concentration provides differently sized errors for various humic substances. While the method seems to be accurate for peat fulvic acids, it provides values higher by 25 – 75 % in the case of DOC from peaty waters and higher by 200 % in the case of nitrated fulvic acids. For mature humic acids from Leonardite (having extremely high absorbance coefficient due to high aromaticity), the estimated values were higher even by 600 %.

Grant dedication – This work was supported by the project Ziel3/Cil3 ČR-Sasko, No. 100018967.

[1] Malcolm R. L., in: Humic substances in the aquatic and terrestrial environment. Allard B., Borén H., Grimvall A. (eds), Lecture Notes in Earth Sciences, Springer Verlag, New York, 33: 9 – 36 (1991).
[2] Water Quality – determination of humic substances. TNV 75 7536, Hydroprojekt CZ a.s., Prague (In Czech).

5Po13
INVESTIGATION OF ELECTROCHEMICAL PROPERTIES OF PHOSPHATIDYLCHOLINE-CHOLESTEROL MIXTURE IN MODEL PHOSPHOLIPID MEMBRANES USING ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE SPECTROSCOPY

Kateřina Nováková[1,2], Tomáš Navrátil[1], Ivana Šestáková[1], Vladimír Mareček[1], Jaromíra Chýlková[2]

[1]J. Heyrovsky Institute of Physical Chemistry of ASCR, v.v.i., Dolejškova 3, 182 23 Prague 8, Czech Republic, katerina.novakova@jh-inst.cas.cz
[2]University of Pardubice, Faculty of Chemical Technology, Institute of Environmental and Chemical Engineering, Studentská 573, 532 10 Pardubice, Czech Republic,

The various types of model membranes are utilized for investigation and for understanding of real biological membrane functionality. In our research, planar phospholipids bilayers were used for the study of electrochemical properties of phosphatidylcholine (lecithin) - cholesterol mixture by electrochemical impedance spectroscopy (EIS) [1]. Geometry of this type of model membrane gave us chemical and electrical access to both sides of this membrane. The mixture of lecithin and cholesterol was used in the form of phospholipid membranes because these two compounds are essential for living cells. From the reason that EIS is a very important tool for investigation of planar lipid bilayers and for characterization of electric properties, we used this method for presented experiments [2,3]. Various ratios between phosphatidylcholine and cholesterol were examined on different types of polycarbonate substrates. The influence of time and temperature on formation of model membranes was studied.

The research was supported by GACR (project No. P208/12/1645) and by University of Pardubice (project No. SGFChT05/2012).

[1] Tomáš Navrátil, Ivana Šestaková, Vladimír Mareček: Int. J. Electrochem. Sci., (2011)
[2] Tomáš Navrátil, Ivana Šestáková, Karel Štulík, et al.: Electroanalysis, (2010)
[3] Martina Parisová, Tomáš Navrátil, Ivana Šestáková, et al.: Int. J. Electrochem. Sci., (2013)

5Po14
PŮSOBENÍ VYBRANÝCH VLIVŮ NA ELEKTRODETEKCI OLEJŮ A PŘÍPADNÝCH IONTŮ VE VODÁCH

Ladislav Novotný

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická , Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, nvt.l@seznam.cz

S možnou detekcí ropných olejů nebo iontů ve vodách zejména s využitím metod na bázi elektrochemie souvisí často i uplatnění lokálních fyzikálně-chemických vlivů. Tak je tomu i u voltamo-vodivostně-potenc-detekce. Dosud byly využívány spíše postupy založené na jednotlivých oddělených elektro-principech. Příkladem je voltametrie, u níž je využíváno přibližně lineární závislosti mezi voltametrickým signálem Δi a změnou kapacity ΔC ve formě $\Delta i = konst \cdot v \cdot \Delta C$, s rychlostí scanu v.

V rámci popisovaného programu se jedná o výzkum vlivů působících jak na jednotlivé procesy, tak na jejich kombinaci. Jde např. o iontové poměry v roztocích, polaritu fází, aglomeraci částic, mezifázové děje ad. Jejich studium přináší možnost dostupnější nebo citlivější detekce sledovaných látek, zvýšení její citlivosti, zlepšení selektivity event. i popis chování zmíněných látek. Zvláště žádané jsou způsoby a postupy, které mohou být uplatněny operativně v široké praxi.

Mezi sledovanými tematy se tak uplatňují např. měření spojená s adsorpčně-desorpčními signály, s operativním sledováním obsahu určených volných iontů v roztoku vedle aglomerátů zahrnujících tyto ionty, sledování doprovodných látek nebo aditiv tvořících součást zmíněných olejů, měření kinetiky dějů využívaných pro přímou či nepřímou detekci jakož i využití teoreticko-experimentálního popisu těchto dějů. Průběžně jsou při popsaném výzkumu i aplikacích využívány i externí patenty, užit. a prům. vzory uvedeného autora příspěvku.

Tato práce vznikla s podporou projektů TACR TA01020730 a MSM č. 0021627502.

5Po15
VLIV PŮVODU AKTIVOVANÉHO KALU NA PROCES DENITRIFIKACE

Jiří Palarčík, Jana Vlačihová, Evelína Erbanová, Miloslav Slezák

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická, Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, Pardubice 532 10

Biologické čištění pomocí aktivovaného kalu je dnes nejrozšířenějším způsobem odstraňování nežádoucích látek z odpadních vod. Aktivovaným kalem nazýváme směsnou kulturu mikroorganismů (různé druhy bakterií, v menší míře také plísně, kvasinky a houby), které jsou volně rozptýleny ve vodě a dále vázány ve formě vloček a zoogleí. Složení aktivovaného kalu (kvalitativní i kvantitativní) závisí převážně na podmínkách během kultivace – složení odpadní vody, druh substrátu, doba zdržení, zatížení atd. [1, 2,3]

V laboratorních podmínkách byl sledován vliv původu aktivovaného kalu na proces denitrifikace. Celkem bylo testováno šest různých vzorků aktivovaného kalu, každý kal pocházel z jiné biologické čistírny odpadních vod, a bylo prokázáno, že původ aktivovaného kalu měl vliv na rychlost odstraňování dusičnanů z odpadní vody.

[1] CHUDOBA, Jan, Michal DOHÁNYOS a Jiří WANNER. Biologické čištění odpadních vod. 1. vydání. Praha: SNTL, 1991, ISBN: 80-03-00611-2.
[2] GERARDI, Michael H. Wastewater Bacteria. 1. vydání. New Jersey: Wiley-Interscience, 2006, ISBN: 978-0-471-20691-0.
[3] BINDZAR, Jan a kolektiv. Základy úpravy a čištění vod. 1. vydání. Praha: VŠCHT Praha, 2009, ISBN: 978-80-7080-729-3.

5Po16
POLYFRIEND: ADVANCED BIO-FRIENDLY POLYMERS

Jaroslav Mosnáček[1], Béla Iván[2], Eva Papajová[1]

[1]*Polymer Institute, Slovak Academy of Sciences, Dúbravská cesta 9, 845 41 Bratislava, Slovakia, jaroslav.mosnacek@savba.sk*
[2]*Department of Polymer Chemistry, Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences, H-1525 Budapest, Pusztaszeri ut 59-67, Hungary, ivan.bela@ttk.mta.hu*

This contribution deals with the presentation of the project "*Polyfriend: Advanced bio-friendly*

polymers" [1] funded by European Regional Development Fund [2] through Hungary-Slovakia Cross-border Co-operation Programme 2007-2013 [3] that provides cooperation between research institutes with long tradition in the field of polymer chemistry.

Farmers in their work encounter a number of problems that are specific to this sector, but regardless of the size of the farm are common for all agricultural production and causes reduced harvests. The goal of the project is a selection of suitable polymers, based on the screening of the commercially available polymeric materials used for mulching and food packaging applications, as well as development of new biodegradable polymeric materials with controlled service lifetime, with properties the best fitting the requirements of the Slovak-Hungarian cross-border agricultural region. The project is focused also on synthesis of polymers useful as a soil conditioner and synthesis of new multifunctional stabilizers, whose diffusion and elution of polymeric material will be negligible, and will fulfill the technical, economic and ecological requirements. The developed products will be applicable in both countries without any necessary modifications with taking advantage of the same climate conditions and the agricultural commodities in the whole Slovak-Hungarian agricultural region.

[1] http://www.polymer.sav.sk/polyfriend
[2] http://europa.eu/legislation_summaries/regional_policy/provisions_and_instruments/g24234_en.htm
[3] http://www.husk-cbc.eu/

European Union
European Regional Development Fund

Hungary-Slovakia
Cross-border Co-operation
Programme 2007-2013

5Po17
STANOVENÍ SEMICHRONICKÝCH TOXICIT U SALÁTU A CIBULE, VČETNĚ AKUTNÍ TOXICITY NA NITĚNKÁCH PRO 1,4-FENYLENDIAMIN

Jiří Pavlovský[1], Alena Ondrúšová[1]

[1]*Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava, jiri.pavlovsky@vsb.cz*

Důležitý pro mnoho odvětví průmyslu (může sloužit pro výrobu Kevlar vláken), ale zároveň zátěž pro životní prostředí a organismy v něm žijící, je p-fenylendiamin. Samostatný je toxický pro vodní organismy. Toxicita není uspokojivě popsána, proto je nutné provedení testů pro zjištění závažnosti ekotoxicity pro životní prostředí. Příspěvek se proto věnuje semichronické toxicitě p-fenylendiaminu na salát (*Lactuca sativa* L.) a cibuli kuchyňské (*Allium cepa* L.), navíc i akutní toxicitě pro vodní organismy - nitěnky (*Tubifex tubifex*).

Při testování cibule kuchyňské [1] na p-fenylendiamin bylo zjištěno, že pro p-fenylendiamin (72 hodin) je inhibiční koncentrace 72hIC50 (20,1±0,1) mg/l. Test na cibuli kuchyňské pro p-fenylendiamin ukázal, že pro tento druh rostliny je tato látka velmi toxická a ekotoxická pro terestickou složku životního prostředí.

Při testování p-fenylendiaminu na semichronickou toxicitu salátu [2] byla 72hIC50 (157,0±0,0) mg/l. Pro salát je p-fenylendiamin mírně toxickou látkou.

Test akutní toxicity p-fenylendiaminu na nitěnkách ukázal, že podle standardního tří minutového testu [3] není p-fenylendiamin vysoce toxický (5000 mg/l - nejvyšší zkoušená koncentrace). Avšak po delším působení je pro nitěnky ekotoxickou látkou, kdy po 0,5 hodině byla LC50 (1826±0) mg/l, po 1 hodině (887,2±0,1) mg/l, po 2 hodinách (351,5±0,1) mg/l a po 3 hodinách (367,7±0,0) mg/l.

Uvedený příspěvek byl podpořen Regionálním materiálově technologickým výzkumným centrem (RMTVC), registračního čísla CZ.1.05/2.1.00/01.0040.

[1] Geirid Fiskesjö: Technical methods section. *Environmental toxikology and water quality*. 1993, Vol. 8, No. 4, p. 461-470.
[2] ISO 17126: Soil quality – determinativ of the effects of pollutants on soil flora – screening test for emergence of lettuce seedlings (*Lactuca sativa* L.). 2005, 7 p.
[3] Miloň Tichý, Zdeněk Roth, Karel Bláha, Andrew P. Worth: Alternativní metody testování toxicity chemických látek in silico. *Chem. Listy*. 2005, Vol. 99, No. 10, p. 675-681.

5Po18
VYBRANÉ IONTOVÉ A SOUVISEJÍCÍ VLIVY PŘI POTENCIOMETRII IONTŮ STŘÍBRA

Ladislav Novotný, Renáta Petráňková, Abraham Kabutey

Univerzita Pardubice, Fakulta chemicko-technologická , Ústav environmentálního a chemického inženýrství, Studentská 573, 532 10 Pardubice, nvt.l@seznam.cz

Mezi nejrozšířenější elektrochemické metody v praxi patří potenciometrie pro sledování iontů ve vodných roztocích. Součástí výzkumu nových možností potenciometrie je i hledání postupů umožňujících analýzu obsahu a chování iontů v analyticky složitých matricích. Mezi takové systémy se řadí i mikroheterogenní roztoky, obsahující aglomeráty o velikosti řádově nano- nebo mikrorozměrů. Jejich příkladem mohou být roztoky povrchově aktivních a bioaktivních látek obsahující micely, roztoky iontů kovů tvořících koloidní nabité částice (např. Fe, Ag, Ti, ...), jakož i příbuzné roztoky tzv. koloidního mikro- či nano- stříbra, železa, titanu, niklu ap., nebo jejich oxidů/hydroxidů.

Měření s využitím různých uspořádání, elektrod. systémů, pH-metrů nebo iono-metrů, podle potřeb i v kombinaci s dalšími metodami jako je voltametrie aj., vyžadují tudíž testování zmíněných analytických stanovení v čistých roztocích, v porovnání se zjišťováním a vyhodnocováním vlivů projevujících se v reálných podmínkách, při práci ve výše zmíněných složitých matricích. Prezentované sdělení poskytuje předběžné informace a výsledky týkající se zahájení zmíněného směru výzkumu. Mezi systémy, kterým je věnována zvýšená aktuální pozornost, patří roztoky obsahující tzv. nano-stříbro (popř. i mikro-stříbro). Průběžně jsou při popsaném výzkumu i aplikacích využívány i externí patenty, užit. a prům. vzory prvního autora příspěvku.

Tato práce vznikla s podporou projektů MSM č. 0021627502 a TACR TA01020730.

5Po19
ODSTRAŇOVÁNÍ URANU Z VODNÝCH ROZTOKŮ

Hana Porschová, Petra Šlapáková, Helena Parschová

Ústav energetiky, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6 - Dejvice, porschoh@vscht.cz

Uran představuje riziko z hlediska chemického a radiologického. Do těla se může dostat požitím a následnou absorpcí z gastrointestinálního traktu (nejčastěji z vody zatížené uranem v místech zvýšeného výskytu uranu v podloží), inhalací (v místech válečných konfliktů z uranových střel ve formě aerosolu nebo na prachových částicích) nebo absorpcí kůží (stupeň absorpce u člověka není znám, u zvířat byla dermální absorpce prokázána pokusy s vysokými koncentracemi uranu) [1, 2]. Vody obsahující toxický uran je třeba čistit, protože jsou hlavním zdrojem příjmu uranu do lidského těla.

V této práci byly prováděny vsádkové a kolonové experimenty, při kterých byly odstraňovány sloučeniny uranu z vodných roztoků pomocí sorbentů. Použity byly anexy: Lewatit DW 630, Smola AMP, Amberlite IRA 900 Cl a Amberlite IRA 910 Cl a také sorbent GEH, což je granulovaný hydratovaný oxid železitý. Anexy byly před sorpcí převedeny do síranové formy. Experimenty byly prováděny s roztoky uranu ve vodovodní nebo demineralizované vodě s přídavkem doprovodných iontů (hydrogenuhličitanů nebo síranů) při pH 8. Za těchto podmínek by se měl uran ve vodě vyskytovat ve formě aniontových (síranových, uhličitanových či hydroxo) komplexů [3], proto byly experimenty prováděny převážně s anexy.

Tato práce vznikla za podpory specifického vysokoškolského výzkumu (MŠMT č. 20/2013).

[1] Jiří Patočka, Jiří Kassa, Rudolf Štětina, Gustav Šafr, Josef Havel: Toxicological aspects of depleted uranium, Journal of Applied Biomedicine, (2004)

[2] Hana Jeligová: Uran v pitné vodě – aktuální toxikologické informace, prezentace ze semináře SZÚ: Aktuální otázky hygieny životního prostředí, (2009)

[3] Pavel Pitter: Hydrochemie, Vydavatelství VŠCHT Praha, (2009)

5Po20
ZÁVISLOST TECHNOLOGICKÝCH PARAMETRŮ NA TEXTURNÍCH A CHEMICKÝCH VLASTNOSTECH KOKSŮ

Jana Serenčíšová[1], Jiřina Vontorová[1], Zdeněk Klika[1], Alena Kožušníková[2]

[1]*Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Katedra analytické chemie a zkoušení materiálu, 17. listopadu 15, 708 33 Ostrava-Poruba, ČR, jana.serencisova@vsb.cz*
[2]*Ústav geoniky AV ČR, v.v.i., Studentská 1768, 708 00 Ostrava-Poruba, ČR*

Nejdůležitějšími a běžně používanými parametry určujícími kvalitu koksu jsou index reaktivity koksu (CRI) a pevnost koksu po reakci (CSR) [1, 2]. Tento příspěvek se zabývá statistickým vyhodnocením základních charakteristik dvaceti vzorků koksů vyrobených v koksovně Třineckých železáren. Byly sledovány korelační vztahy mezi texturními (TIV – celkový intrúzní objem, TPA – celková plocha pórů, P – celková porozita), chemickými (A^d – obsah popela, V^{daf} – obsah prchavé hořlaviny) a technologickými vlastnostmi koksů (CRI, CSR). Data byla vyhodnocena pomocí software QC-Expert statistickými moduly „vícerozměrné metody“ (korelace) a „základní statistika“ (jednorozměrová analýza). Nejvýznamnější vliv na indexy CRI a CSR byl pozorován u texturních vlastností, naopak chemické vlastnosti měly vliv minimální. CSR index byl texturními vlastnostmi ovlivňován více než index CRI. Touto studií byl také potvrzen lineární vztah mezi CRI a CSR parametry koksů. Nezávislost a normalita dat byla s výjimkou parametru CRI prokázána jednorozměrovou analýzou.

Autoři děkují za finanční podporu Regionálnímu materiálově technologickému výzkumnému centru (RMTVC), registračního čísla CZ.1.05/2.1.00/01.0040 a SP2013/64 – Specifickému výzkumu v metalurgickém, materiálovém a procesním inženýrství a také Výzkumnému fondu pro uhlí a ocel (RFCR-CT-2010-00008).

[1] Sławomira Pusz, Roman Buszko: Reflectance parameters of cokes in relation to their reactivity index (CRI) and the strength after reaction (CSR), from coals of the Upper Silesian Coal Basin, Poland. *International Journal of Coal Geology*. 2012, Vol. 90-91, p. 43-49.
[2] A. Koszorek, M. Krzesińska, S. Pusz, B. Pilawa, B. Kwiecińska: Relationship between the technical parameters of cokes produced from blends of three Polish coals of different coking ability. *International Journal of Coal Geology*. 2009, Vol. 77, p. 363-371.

5Po21
TOXIC METALS AND CELL WALL POLYSACCHARIDES

Zuzana Vatehová[1], Anna Malovíková[1], Anna Kákošová[1], Karin Kollárová[1], Danica Kučerová[1], Desana Lišková[1]

[1]*Institute of Chemistry, Slovak Academy of Sciences, 845 38 Bratislava, Slovakia*

The plant cell wall is an important cell feature that performs numerous essential functions [1]. As the first barrier it prevents the input of toxic metals into the cell and plant organ, but this defense mechanism is still fully unknown. In this connection the effect of toxic cations on cell wall polysaccharides composition in roots of maize has been studied.

Zea mays L. as a member of the *Poales*, has peculiar primary cell walls of the type II [2] distinguished by higher content of hemicelluloses (arabinoxylan, arabinogalactan, xyloglucan) and lower content of pectin compared to dicots. A combination of extractions (hot water and alkali), chemical (content of uronic acids, phenolics, proteins), and analytical (FTIR, HPLC, GLS) methods for the characterization of cell wall composition in plants treated with cadmium cations were used. The results indicate that the cell wall functions not only as a sink for toxic metal accumulation, but is also extensively modified under metal stress.

Better understanding of plant cell wall function in defense against toxic metals could point out plants utilizable, as a green technique (phytoremediation), for cleaning up toxic metal-contaminated soils and water.

This work was supported by the Slovak Research and Development Agency, contract No. APVV-0140-10, Slovak Grant Agency for Science VEGA 1/0817/12, VEGA 0085/13 and COST Action FA0905.

[1] Keegstra K., Plant Physiol. 2010, 54: 483-486.
[2] Carpita NC. & Gibeaut DM., Plant J. 1993, 3:1-30.

POSTERY - SEKCIA 6 CHEMPROGRESS

6Po01
MOLECULAR STRUCTURE EFFECTS IN DEGRADATION BY VAPOUR PHASE HYDROGEN PEROXIDE IN COMBINATION WITH UV RADIATION (UV/VPHP PROCESS)

Jiří Kovářík[1], Martin Novák[1], Alena Nováková[1], Barbora Ďurčiová[1], Petr Kačer[1]

[1]*Vysoká škola chemicko-technologická, Technická 5, 166 28, Praha 6 – Dejvice, kovarikb@vscht.cz*

This work is focused on the area of development of the decontamination method utilizing vapour phase hydrogen peroxide as an efficient agent in combination with UV radiation (UV/VPHP process). The aim of this work was to enrich the amount of knowledge about the mechanisms and effects associated with the VPHP or UV/VPHP degradation process. A serie of model substances (benzaldehyde derivatives) was used as model organic contaminants for this purpose.

The experiments were carried out in a special laboratory device constructed especially for such study. The degradation processes of the model substances were investigated and the influence of the molecular structure effects was then evaluated as well. The VPHP and UV/VPHP processes were compared and the synergistic effect of UV radiation and H_2O_2 was discussed.

The principal result of this work is the confirmation of the synergistic effect of H_2O_2 and UV radiation on the efficiency of degradation of model compounds. UV radiation can promote VPHP degradation of substances which are inert to sole VPHP. Nevertheless, it has been discovered that it is necessary to take into consideration also other effects, such as the UV radiation absorption by the model substance, its degradation products as well as the intermediates.

Acknowledgement
This work was financially supported by the Technical Agency of the Czech Republic (Grants TACR TA02011185) and Internal Grant Agency of the Faculty of Chemical Technology, ICT Prague.

6Po02
VYUŽITÍ MODIFIKÁTORŮ PH PRO DOSAŽENÍ PH-NEZÁVISLÉHO DISOLUČNÍHO PROFILU SLABĚ BAZICKÉHO LÉČIVA Z MATRICOVÝCH TABLET

Eliška Mašková[1], Kateřina Dvořáčková[1], Jan Muselík[1], Petr Doležel[1]

[1]*Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, maskovae@vfu.cz*

Vzhledem k proměnlivé hodnotě pH v jednotlivých částech gastrointestinálního traktu (GIT) je velmi obtížné zajistit rovnoměrné vstřebávání léčiv povahy slabých kyselin, zásad nebo jejich solí, jejichž rozpustnost je závislá na pH disolučního prostředí [1]. K zajištění vhodné rozpustnosti a konstantního uvolňování léčiv nezávisle na pH se mohou do matricových tablet přidat tzv. pH modifikátory. Včleněním těchto látek dochází k vytvoření mikroprostředí tablety s určitou hodnotou pH zajišťující rovnoměrnou rozpustnost léčivé látky. Výsledkem je pH nezávislý disoluční profil léčiva, zajišťující rovnoměrnou absorpci a následně biologickou dostupnost [2,3].

Cílem tohoto projektu byla optimalizace složení hydrofilně-lipofilních matricových tablet s obsahem kyselých modifikátorů pH (kyselina citrónová, fumarová, itakonová) pro dosažení rovnoměrného uvolňování slabě bazického léčiva verapamil-hydrochloridu nezávisle na pH okolního prostředí. Byla sledována závislost vlivu typu a koncentrace přidaného pH modifikátoru na uvolňování léčiva a pH mikroprostředí matrice. Součástí bylo také statistické hodnocení vztahu mezi pH gelové vrstvy tablet, množstvím uvolněného léčiva v průběhu disolučního testu simulujícího reálné podmínky v segmentech GIT a vlastnostmi kyselin (rozpustnost, pKa) analýzou vícerozměrných dat.

Výsledky prokázaly signifikantní vliv kyselých modifikátorů na sledované parametry, významným se ukázal vliv zejména koncentrace kyseliny v matrici a její síla. Překvapivě vliv rozpustnosti kyseliny se neprokázal.

Tento projekt byl realizován z grantu IGA VFU Brno (projekt ev. č. 99 /2013/FaF).

[1] Horter D., Dressman J.B.: Advanced Drug Delivery Reviews (2001)
[2] Dvořáčková K.: Chemické listy (2009)
[3] Mehta D.M., Parejiya P.B., Barot B.S., Shelat, P.K.: Asian Journal of Pharmaceutical Sciences (2012)

6Po03
PYROLÝZA BINÁRNÍCH SMĚSÍ C4 A C6 UHLOVODÍKŮ

Jiří Petrů[1], Petr Zámostný[1], Zdeněk Bělohlav[1]

[1]Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemické technologie, Ústav organické technologie, Technická 5, 166 28 Praha 6, jiri.petru@vscht.cz

Jedním z petrochemických proudů, které jsou zpracovávány pyrolýzou, je uhlovodíková frakce C4. Ta je kvůli využití kapacity pyrolýzní vlásenky velmi často kopyrolyzována s vyšší alkanickou surovinou. Vzájemná interakce plynných a výševroucích uhlovodíků, však může komplikovat použití tradičních predikčních modelů pyrolýzy. V této práci tak byla studována vzájemná interakce těchto uhlovodíků.

V pyrolýzním plynovém chromatografu [1] byly testovány plynné uhlovodíkové směsi obsahující hexan, nebo cyklohexan, společně s vybraným C4 uhlovodíkem. Pozornost byla věnována zejména změně konverze C4 uhlovodíků v důsledku jejich interakce s radikály pocházejícími z kopyrolyzo–vaného uhlovodíku C6. Vzhledem k tomu, že byl poměr jednotlivých uhlovodíků v průběhu experimentů měněn, mohla být sledována změna konverze obou uhlovodíků v závislosti na obsahu C4 uhlovodíku ve směsi. Tyto experimentální závislosti byly vyhodnoceny pomocí regresní analýzy v programu ERA 3.0 [2]. Jednotlivé C4 uhlovodíky tak byly kvantitativně porovnány z hlediska koncentrace aktivních radikálů z nich pocházejících a z hlediska snadnosti abstrakce atomu vodíku. Bylo tak například ukázáno, že při vyšších koncentracích podporují lineární alkeny, narozdíl od izobutenu, přeměnu cyklohexanu a dále bylo ukázáno, že n-hexan poskytuje do systému až o řád více aktivních radikálů než ostatní uhlovodíky, tudíž podporuje jejich konverzi.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č. 20/2013)

[1] P. Zámostný, Z. Bělohlav, L. Starkbaumová, J. Patera, J. Anal. Appl. Pyrolysis, 87 (2010) 207.
[2] P. Zamostny, Z. Belohlav, Comput. Chem. (Oxford, U. K.), 23 (1999) 479.

6Po04
ROZPOUŠTĚNÍ DOLOMITU VE ZŘEĎĚNÝCH ROZTOCÍCH KYSELINY SÍROVÉ

Martin Pultar[1], Ivona Sedlářová [1], Jan Vídenský[1]

[1]Ústav anorganické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Technická 5, Praha 6 – Dejvice, 166 28, Česká republika, e-mail: martin.pultar@vscht.cz

Studovaný proces rozpouštění dolomitu ve zředěných roztocích kyseliny sírové spadá do oblasti heterogenních nekatalyzovaných reakcí, který by mohl nalézt zajímavé průmyslové využití. V této práci byl sledován vliv míchání, teploty, koncentrace kyseliny a velikosti částic dolomitu na stupeň jeho přeměny v čase. Reakce byla prováděna v polovsádkovém izotermním míchaném reaktoru a ke sledování jejího průběhu byla použita metoda pH-stat titrace. K charakterizaci reakčního systému byly stanoveny základní kinetické parametry. Získaná data byla zpracována podle modelové představy nezreagovaného jádra s využitím kinetické rovnice mocninného typu.

Pro studovaný reakční systém byla zjištěna značná teplotní závislost. Vliv míchání a koncentrace použité kyseliny neměl na průběh reakce výrazný vliv. Z experimentálních dat byly stanoveny hodnoty zdánlivé aktivační energie, které v proměřovaném koncentračním intervalu od 10 do 100 mol m^{-3} mírně rostly v rozsahu od 49 do 59 kJ mol^{-1}. Z těchto hodnot je možno usoudit, že reakce probíhá v přechodné oblasti s malým vlivem vnějšího přenosu hmoty. To bylo potvrzeno i výpočty z kriteriálních rovnic.

Poděkování: Tato práce byla financována z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum (MŠMT č.20/2013).

6Po05
HYDROGENACE NITRILŮ NA KOVOVÝCH KATALYZÁTORECH V PLYNNÉ FÁZI

Nikola Ruhswurmová, Jiří Trejbal

Ústav organické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická, Technická , 166 28 Praha 6, ČR, Nikola.Ruhswurmova@vscht.cz

Hydrogenace nitrilů je jednou z nejpoužívanějších metod přípravy aminů. Mechanismus reakce zahrnuje sled následných a bočných reakcí, kterými vzniká směs primárních, sekundárních a terciárních aminů. Nejčastěji se hydrogenace nitrilů provádí v kapalné fázi za

zvýšeného tlaku vodíku a v přítomnosti heterogenních katalyzátorů.

Tato práce se zabývá studiem hydrogenace nitrilů v plynné fázi za nestacionárních podmínek. Zkoumána je selektivita a reakční rychlost v závislosti na použitém katalyzátoru a reakčních podmínkách.

Hydrogenace je prováděna v aparatuře umožňující on-line analýzu reakční směsi. Získaná směs primárních, sekundárních, terciárních aminů a jiných látek se liší různým zastoupením jednotlivých produktů v závislosti na použitých reakčních podmínkách a druhu kovu jako katalyzátoru. Obecně platí, že se selektivita na sekundární a terciární aminy zvyšuje v pořadí Co < Ni < Ru < Rh < Pd < Pt. Zajímavostí je, že hydrogenací nitrilů na kovových katalyzátorech nanesených na aktivním uhlí vznikají v nezanedbatelném množství také uhlovodíky a tato práce se dále zabývá kvantifikací jejich vzniku.

Financováno z účelové podpory na specifický vysokoškolský výzkum MŠMT č.20/2013 (IGA VŠCHT: A2_FCHT_2013_013).

6Po06
ROVNOVÁHA KAPALINA-PÁRA V SYSTÉMU ANILIN, N-METHYLANILIN A N,N-DIMETHYLANILIN

Jiří Trejbal, Rudolf Pospíšil, Martin Zapletal

Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, 166 28 Praha 6 - Dejvice, jiri.trejbal@vscht.cz

Tato práce studuje fázové rovnováhy kapalina-pára v systémech anilin-N-methylanilin, anilin-N,N-dimethylanilin a N-methylanilin-N,N-dimethylanilin. Naměřená data budou využita k optimalizaci průmyslového rektifikačního čištění surového N-methylanilinu. Rovnováhy byly proměřeny při tlacích 90 mbar a 380 mbar. K tomuto měření byla využita aparatura na diferenciální destilaci a odebírané vzorky kapalné a parní fáze byly analyzovány metodou plynové chromatografie.

Bylo zjištěno, že systém anilin-N,N-dimethylanilin tvoří azeotropickou směs s minimem bodu varu, čehož se dá využít při azeotropické destilaci jako metody čištění N-methylanilinu coby produktu průmyslové syntézy. Dále bylo zjištěno, že směs anilin-N-methylanilin vykazuje kladnou odchylku od Raoultova zákona bez extrému a systém N-methylanilin-N,N-dimethylanilin se chová téměř ideálně.

6Po07
VLIV VÝBĚRU POLYMERU NA RYCHLOST UVOLŇOVÁNÍ NYSTATINUZ MUKOADHEZIVNÍCH FILMŮ MATRICOVÉHO TYPU

Markéta Valtusová[1], Hana Landová[1], David Vetchý[1], Jan Gajdziok[1]

[1]Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, VFU Brno, Palackého 1/3, 612 42 Brno, valtusovam@vfu.cz

Orální kandidóza je i dnes stálým aktuálním medicínským problémem. Původcem všech forem orální kandidózy je zejména *C. albicans*. Prevalence kandidových infekcí stále narůstá díky zvyšující se spotřebě širokospektrých antibiotik, kortikosteroidů či imunosupresiv [1].

Možnosti lokální terapie jsou poměrně omezené. Používají se polotuhé, nebo kapalné lékové formy, jejichž nevýhodou je krátké setrvání v místě aplikace. Delší dobu účinku nabízí bukální tablety, z nichž některé jsou v současnosti registrované (v ČR Loramyc).

Jako další možná alternativa se nabízí mukoadhezivní bukální filmy, které mají řadu výhod oproti jiným lékovým formám díky svému tvaru, velikosti a tvarové flexibilitě. Výhodou je i absence diskomfortu spojeného s tabletou (omezení při mluvení, příjmu potravy a pocitu cizího tělesa v ústech).

Cílem tohoto sdělení je popsat vliv výběru polymeru na rychlost uvolňování nystatinu z mukoadhezivního filmu matricového typu určeného k terapii kandidóz v dutině ústní. Jako základy filmů byly použity sodná sůl karboxymethylcelulosy, polyethylenoxid a jejich kombinace, které byly připraveny metodou odpařování rozpouštědla. Nystatin byl vybrán díky své nízké toxicitě, minimální interakci s jinými léčivy, a protože je jeho účinek výhradně lokální (nevstřebává se z GIT) [2]. Polymery byly vybrány na základě požadavků pro tuto lékovou formu (schopnost vazby s mucinem, netoxičnost aj.) [3].

Tento projekt byl realizován za finanční podpory z grantu IGA VFU Brno (projekt ev. č. 96/2013/FaF).

[1] KRŇOULOVÁ J, VALENTOVÁ E, ZEMANOVÁ J. Orální kandidóza. Prakt. zub. lék. 2000, 48(2): 49-63

[2] http://www.vuab.cz/index/clanky/kategorie/nystatin, 15.1.2013

[3] GAJDZIOK J, VETCHÝ D. Mukoadhezivní polymery v lékových formách. Chem. Listy 2012, 106: 632-638

6Po08
FYZIKÁLNÍ VLASTNOSTI SODNÉ SOLI KARBOXYMETHYLCELULOSY V TEXTILNÍ PODOBĚ

Lenka Vinklárková[1], Ruta Masteiková[1], Tomáš Sopuch[2]

[1]Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého tř. 1/3, 612 42 Brno, vinklarkoval@vfu.cz
[2]Holzbecher spol. s.r.o. barevna a bělidlo Zlíč, divize Holzbecher Medical, 552 03 Česká Skalice - Zlíč

Sodná sůl karboxymethylcelulosy (NaCMC) vzniká chemickou modifikací celulosy kyselinou monochloroctovou v zásaditém prostředí. Podle podmínek reakce se získávají deriváty o různém stupni substituce (DS). Teoreticky lze dosáhnout hodnoty DS 3, v praxi se však používají materiály s DS pod 1,45 [1]. Karboxymethylcelulosa (CMC) patří mezi základní farmaceutické pomocné látky. Kromě toho se používá v potravinářství, kosmetice či technických oborech, a v posledních desetiletích nachází uplatnění jako materiál pro výrobu krytí na rány, umožňující vlhké hojení.

Jelikož stupeň substituce ovlivňuje vlastnosti CMC zásadním způsobem, bylo cílem práce sledování vlivu DS na nasákavost textilní formy NaCMC v různých médiích v čase. Byly zkoumány vzorky s DS v rozmezí 0,1-0,55 na námi vytvořeném modelu rány. Jako média se v experimentu použily čištěná voda a roztoky imitující prostředí v organismu a v ráně (0,9% roztok NaCl, lékopisné tlumivé roztoky o pH 7,2 a 7,4). Bylo zjištěno, že nasávání zkoumaných roztoků za současného gelovatění probíhá u textilií z NaCMC velmi rychle během prvních 15 minut, pak se stav mění jen minimálně. Nejvyšší nasákavost, která narůstala se zvyšujícím se DS, vykazovaly zkoumané látky v čištěné vodě. V ostatních médiích naopak byla nasákavost nižší a se zvyšujícím se DS pozvolna klesala.

Výsledky práce vznikly za finančního přispění TA ČR v rámci řešení projektu programu ALFA č.TA01010244.

[1] M. J. Waring, D. Parsons: Biomaterials, (2001)

6Po09
VLIV POMOCNÝCH LÁTEK NA VLASTNOSTI A DISOLUČNÍ PROFIL LIQUISOLID SYSTÉMŮ

Barbora Vraníková[1], Jan Gajdziok[1], Aleš Franc[1], David Vetchý[1], Veronika Czerneková[1], Ivana Wawrzyczková[1], Aneta Faltýnková[1], Monika Fileková[1]

[1] Ústav technologie léků, Farmaceutická fakulta, Veterinární a farmaceutická univerzita Brno, Palackého 1 – 3, 612 42 Brno, vranikovab@vfu.cz

Léčiva špatně rozpustná ve vodě tvoří až 60 % dostupných účinných látek a díky nízké biologické dostupnosti představují jeden z hlavních problémů formulace pevných lékových forem pro systémovou absorpci účinné látky. Odborná literatura popisuje řadu metod vedoucích k úpravě disolučního profilu a zvýšení biologické dostupnosti těchto léčiv, přičemž jako jeden z nejperspektivnějších postupů se jeví formulace liquisolid systémů (LSS).

LSS jsou přípravky získané nasorbováním léčiva v kapalné fázi (roztok, suspenze, emulze) na pevný, vysoce sorpční nosič (mikrokrystalická celulosa, magnesium aluminiummetasilikáty, apod.), který je následně obalen materiálem s velkým specifickým povrchem částic (koloidní oxid křemičitý) za vzniku volně tekoucího, nepřilnavého prášku s vlastnostmi vhodnými pro další zpracování (tabletování, plnění do tobolek).

V porovnání s konvenčními přípravky mají LSS řadu výhod, mezi něž patří jednoduché zpracování, nízké výrobní náklady a zajištění optimálního *in vitro* i *in vivo* uvolňování léčiva. Hlavní výhodou těchto moderních formulací je však zvýšení biologické dostupnosti léčiva začleněného v kapalné podobě, které se již po podání do organismu nemusí rozpouštět, a je tedy okamžitě dostupné pro absorpci.

Cílem experimentu byla příprava a následné *in vitro* hodnocení LSS s obsahem hypolipidemika rosuvastatinu, které by vyhovovaly lékopisným parametrům a u kterých je díky výhodnějšímu disolučnímu profilu předpoklad zlepšené biologické dostupnosti léčiva.

Práce vznikla za podpory IGA VFU č. 82/2013/FaF

AUTORSKÝ INDEX

A

Achbergerová L. 222
Adam R. 167
Adolfová L. 167
Alberti M. 155, 163
Almáši M. 99
Ambrová M. 85
Andicsová A. 102
Ardu A. 190

B

Babič D. 199
Bajáková J. 69
Bajus M. 69, 130
Balcar L. 127
Balcarová Z. 153
Balintová J. 77, 140
Balzerová A. 87
Bandžuchová L. 128
Barek J. 149
Bartl P. 74
Bartoňová L. 157
Bartůněk V. 168
Beinrohr E. 84
Bělina P. 168, 219
Bělohlav Z. 130, 234
Beneš J. 122
Benko J. 218
Benkocká M. 147
Benkovičová M. 192
Běťák J. 212
Bhosale D. 109
Bílek M. 168
Blahut J. 169
Blašková M. 72
Bobeničová M. 72
Boča M. 173
Boča R. 177
Bodík I. 69
Bodor R. 78
Bogomolova A. Y. 101
Boržíková J. 192, 216
Boudenne A. 81
Bouzek K. 119, 131, 132, 135, 136, 137
Braunová A. 106
Brestenská B. 117
Brožek V. 176
Brus J. 168
Brusová H. 73
Budovská M. 193, 214
Bureš F. 67, 196, 207, 214
Buřičová L. 204
Burkovičová A. 167
Bustin D. 80
Bystroň T. 136
Bystroňová J. 102, 193

C

Cabal J. 206
Čacho F. 84
Cannas C. 190
Capek I. 223
Capek P. 194, 223
Čaplovič J. 121
Čaplovičová M. 178
Cardová L. 194
Čech J. 188
Cehlárik Ľ. 195
Čejka J. 99
Čeklovský A. 169
Černá K. 218
Černák M. 184
Černoch P. 116
Černý I. 205
Červenák J. 223
Čežíková J. 138
Chaloupek J. 69
Charitidis C. A. 114
Chlupatý T. 92, 168, 175
Chodák I. 115, 199, 208
Chovancová A. 82
Chvátil D. 148
Chvojka J. 69
Chyba A. 123
Chýlková J. 128, 228
Chytil P. 115
Čibová A. 195
Ciesarová Z. 121
Cimermanová T. 124
Ciolino A. 101
Císařová I. 98
Conde J. E. 155

Čonka P. 195
Čuba V. 76, 223
Čuda J. 160
Culková E. 80
Čurmová S. 139
Cvejn D. 196
Czerneková V. 236

D

Dabrowska A. 140
Danč L. 78
Daňhel A. 77, 140
Danielik V. 174
Danko M. 102, 198
Datta K. K. R. 86
David T. 170
Dejmkova H. 149
Demčáková S. 141
Devínsky F. 186
Djurado D. 104
Dočekalová H. 153
Dohnal V. 150
Dohnalová Ž. 167
Dolenský B. 152
Doležel P. 233
Domčeková S. 89, 90, 114
Doráková A. 172
Doroshenko I. 170
Doroshenko M. 198
Dostál L. 172
Drábik M. 171
Drabina P. 110
Drašar P. 194, 200, 205, 213, 217
Drtinová B. 167
Ďurčeková M. 89
Ďurčiová B. 233
Durdiak J. 80
Durmis J. 198
Dušek J. 196
Dušek L. 127, 128, 224
Dvořáčková K. 233
Dvořák Z. 96
Dvoranová D. 72
Dytrtová Jaklová J. 74

E

Eigner V. 147
Elečko J. 197
Erbanová E. 224, 229
Erben M. 94, 103, 172
Erdelyi B. 80
Etrych T. 115

F

Faltýnková A. 236
Faltys T. 145
Fargašová A. 83
Fedorko P. 81
Fedorková A. 73, 75
Fedoročková A. 172
Fellner P. 174
Fencl J. 121
Fíla V. 119
Fileková M. 236
Filip J. 87, 89, 158, 160
Filip V. 124
Filippov S. K. 101, 116
Florjańczyk Z. 107
Fojta M. 77, 140
Franc A. 236
Fraňová S. 194
Fridrichová M. 98

G

Gabčová J. 174
Gabriele F. 139
Gajdoš V. 141
Gajdziok J. 235, 236
Gál M. 85
Gaľa L. 142, 201
Gáliková Ľ. 171
Gallo J. 154
Gazova Z. 201
Gemeiner P. 158
Głowacki I. 96
Gonda J. 108, 197, 202, 211, 214
Gorovenko R. 142
Goruška J. 218
Grochala W. 95
Gurišová V. 173
Gyepes R. 99, 186
Györyová K. 94, 174, 182

H

Hájeková E. 130
Hájíček J. 111
Hájková A. 72
Hajzer V. 198
Halaška J. 100

Halászová S. 143
Halinkovičová M. 216
Halko R. 139
Hámborská 157
Hamuľaková S. 108, 201
Hanusek J. 110, 200, 209
Havel J. 155, 163
Havlíková M. 144, 149
Havran L. 77, 140
Havránková E. 112
Hejnar O. 143
Henke P. 84, 190
Henych V. 147
Hergelová V. 134
Herman D. 226
Hermann H. 169
Hermann P. 94, 97, 165, 170, 179, 180, 181, 182
Herrmannová M. 219, 221
Hess L. 145
Heželová M. 141
Híveš J. 85
Hlásniková J. 123, 124, 125, 129
Hloušková Z. 223
Hnát J. 137
Hocek M. 77, 140
Holá K. 86
Holcová K. 88, 90
Holubcová D. 219
Homzová K. 174
Honzíček J. 103, 187
Hoogenboom R. 101
Horák Z. 148
Horáková P. 77
Horňáková B. 127, 128, 224
Horníček J. 218
Horova A. 208, 226
Hrabálek A. 195
Hrabinová M. 108
Hradilová Š. 78, 160, 165
Hradski J. 78
Hrdlovič P. 102
Hrochová Z. 72
Hrubovčáková M. 73
Hrubý M. 101, 116, 122, 204, 211, 213
Hrvolová B. 224
Hudák J. 177
Huličiak M. 144, 149
Hušák 147
Husáková L. 145, 164
Husáriková L. 71
Husičková V. 87

I

Ilčíková M. 198
Ilkovič S. 186
Imramovský A. 109, 196, 209
Imrich J. 107, 108, 216
Iordache A. M. 143
Iván B. 229

J

Jaček M. 145
Jacková D. 108
Jakl M. 74
Jakubek M. 152
Jambor B. 130
Jáné E. 146
Janigová I. 104, 199
Jankurová Z. 88, 114
Janovec L. 108, 201, 208, 216
Januščák J. 199
Jarčušková J. 112
Javorová K. 117
Jegorov A. 147
Jelen F. 150
Jergel M. 192
Jerigová M. 143
Jirátová M. 211
John J. 74
Jomová K. 199
Jóna E. 88
Jorda R. 196
Jořenek M. 225
Josieková J. 146
Jóźwiak A. 107
Jun D. 226
Jung J. 96
Junková J. 168
Jurášek M. 200, 213, 217
Jurečková Z. 72
Jurišová J. 174

K

Kabátová D. 78
Kabutey A. 231
Kačer P. 199, 215, 233
Kákošová A. 232
Kalina J. 79, 224
Kaliňák K. M. 71
Kameníček J. 220
Kamlar M. 111

Kammel R. 200
Kampová H. 91
Kamrádek M. 87
Karaba A. 130
Karas F. 132, 137
Karlíková M. 89
Karolová L. 185
Kasák P. 105
Kasálková Slepičková N. 178, 183
Kasparek A. 226
Kaszonyi A. 132, 133, 134
Kerekeš K. 85
Kindl M. 215
Kleckerová A. 153
Klečková M. 218, 220
Kleinová A. 104, 115
Klika Z. 232
Klikar M. 196
Klikarová J. 91
Klíma J. 83
Kloda M. 98
Kmoníčková E. 200
Knor M. 104
Kodým R. 132, 136
Kohutová H. 225
Koktan J. 79, 147
Kolářová K. 175, 188
Kolláriková G. 105
Kollárová K. 232
Kolská Z. 147
Koman M. 181
Konečný P. 180
Kopcová M. 90
Korabecny J. 201, 208
Kosednar-Legenstein B. 171
Košek L. 139
Košťáková E. 69
Kostura B. 225
Kotek J. 97, 169, 179, 180, 181
Kotková Z. 97
Kotlár M. 192
Kotwica K. 104
Koupilová I. 147
Kováčová M. 202
Kovář J. 211
Kovářík J. 233
Kovářová J. 203
Koynov K. 198
Kozák J. 194
Kozák O. 86
Kozánková J. 86
Kožíšek J. 192
Kožušníková A. 180, 232
Krajčovič J. 216
Král V. 147, 151, 152
Králik M. 174
Králová J. 122
Králová Orságová Z. 166
KrálV. 79
Krátký M. 203
Kratochvíl 73
Kratochvíl B. 71, 147
Kratochvíl P. 106
Kratochvíl T. 145, 164
Kratochvíla J. 81
Krausová I. 148
Krchová L. 126
Krečmerová M. 206
Krejčí O. 226
Krenkova Z. 226
Kreps F. 123, 124, 125
Krist P. 148
Krištofíková Ľ. 86
Kříž J. 116
Kríž M. 114
Křižan M. 94
Kronek J. 104, 105
Kroneková Z. 105
Krtička M. 228
Krupa I. 81, 114
Krupcik J. 142
Krupka J. 84, 135
Kryštof V. 196
Kuba M. 154
Kubala M. 144, 149
Kubát P. 84, 190
Kubíček V. 170, 180, 181
Kubíková B. 173
Kuca K. 108, 201, 206, 208, 226
Kučerová D. 232
Kuchár J. 99
Kuchtanin V. 99
Kučka J. 101, 122, 204, 213
Kudrlička L. 138
Kueberuwa G. 115
Kukurová K. 121
Kulhánek J. 214
Kundys A. 107
Kunes M. 226
Kupková M. 73
Kurach E. 104
Kuzma M. 199, 215
Kvítek L. 78, 83, 87, 88, 89, 221
Kvítek O. 182, 204
Kyselka J. 124

L

Labuda J. 84, 141, 163
Lacík I. 82, 105
Laga R. 106, 115
Lagová A. 115
Landová H. 235
Lapčík L. 188
Leitner J. 87
Lemr K. 143
Lenz M. 183
Lépesová L. 133
Lettieri R. 194
Líbalová M. 175
Linert W. 177
Liška A. 91
Lišková D. 232
Lišková V. 145
Lobotka P. 185
Lokaj J. 80, 205
Longin O. 205
Lorenc D. 151
Lubal P. 97, 165
Ludvík J. 83, 91
Lukáš D. 69
Lukeš I. 94, 170, 182
Lukeš V. 102
Luňáková P. 97, 175, 185
Lustoň J. 104
Luxová J. 98, 185
Lynn G. M. 115

M

Machalíková V. 168
Macíčková-Cahová H. 77
Macková H. 101
Magdolen P. 195
Maier G. 171
Majková E. 192
Mala P. 149
Málek J. 138, 145
Malinčík J. 118
Mališ J. 131
Málková K. 77
Malovíková A. 232
Manová A. 84
Mařák D. 206
Marchalín Š. 216
Mareček V. 228
Marek J. 206
Marková L. 121
Martinková J. 128, 226
Martinková M. 108, 197, 202, 211
Masár M. 78
Mašek I. 128
Mašková E. 233
Masteiková R. 236
Mastihuba V. 123
Mastihubová M. 123
Mastný L. 176
Mastný M. 218
Matějčková J. 145
Matějka P. 79, 147
Matelková K. 177
Mathauserová J. 98
Mattová J. 122, 204
Matulková I. 98, 190
Matuška M. 186
Matuška O. 199
Mazúr M. 71, 181
Mečiarová M. 213
Melicherčík M. 120
Melicherčíková D. 120
Méndez E. M. P. 155
Ménová P. 77
Merkoçi A. 159
Mezeiová E. 108
Mezlíková M. 168
Michal R. 178
Michaljaničová I. 178
Michalowski T. 95
Mičušík M. 81, 207
Mika J. 149
Mikeš P. 69
Miklík D. 207
Mikulášek P. 126, 128, 187, 226
Mikušová L. 122
Milata V. 112, 120, 202, 205, 216
Milatová E. 202
Milde D. 76, 154, 165
Mistríková J. 112
Mizera J. 148, 150
Mokrejš P. 226
Moncoľ J. 99, 100, 181, 205
Monnery B. 101
Mosinger J. 84, 190
Mošková J. D. 81
Mosnáček J. 198, 229
Mravec D. 132
Mucha M. 79, 90
Múčka V. 223
Muñiz A. E. 159
Muselík J. 233
Musil K. 150
Musilek K. 208, 226

Musilová I. 126

N

Nahálka J. 222
Navrátil R. 150
Navrátil T. 228
Navrátilová K. 151
Nedbal J. 104
Neděla O. 183
Němec I. 98
Němec P. 98, 163
Němeček M. 136, 227
Němečková D. 112, 113
Nepovimova E. 208
Netopilík M. 106
Nevěčná T. 221
Nižňanský D. 190
Noskovičová E. 151
Novák F. 228
Novák I. 115, 208
Novák M. 233
Nováková A. 233
Nováková K. 228
Novotný L. 128, 229, 231
Novotný M. 179, 219
Nový Z. 122
Nowakowski R. 104

O

Okenicová L. 139
Olahová N. 130
Olejník R. 93
Omastová M. 81, 114, 207
Ondrúšová A. 230
Ondrušová D. 88, 89, 90, 114
Oriňák A. 73, 80, 159, 166
Oriňáková R. 73, 75, 80, 159, 166
Orolinová E. 144, 149
Orság P. 77
Otmar M. 206

P

Padělková Y. 187
Padělková Z. 91, 92, 93, 94, 168, 172, 179, 187, 210
Paidar M. 131, 132, 135, 137, 138
Pajtášová M. 88, 89
Palarčík J. 109, 229
Paliesková J. 88
Pálszegi T. 146
Panáček A. 78, 83, 87, 88, 89
Pánek J. 101, 116
Panyala N. R. 155
Papajová E. 229
Parchaňský V. 152
Pařík P. 209, 219
Parobková P. 147
Parschová H. 227, 231
Patera J. 130
Pauk K. 209
Pauk V. 143
Paúrová M. 179
Pavlíček V. 152
Pavlovský J. 230
Pazdera P. 112, 113
Pechar M. 106, 115
Pechoušek J. 87, 89
Pejchal V. 91, 209, 210
Pejchalová M. 210
Pejchar K. 69
Pelcová P. 153
Pérko J. 209
Peterková J. 180
Petráňková R. 231
Petřík M. 122
Petrů J. 130, 234
Pfleger J. 104
Pikna Ľ. 141
Pilařová I. 153, 165
Pinkas j. 189
Pinkas J. 170
Pionteck J. 207
Píšlová M. 175
Pistulka P. 138
Pitucha T. 212
Pivoňková H. 77
Plesch G. 178
Plevová E. 180
Plevová K. 112
Plichta A. 107
Plucha V. 138
Plucnara M. 77
Pluháček T. 154
Pniok M. 180
Podešva J. 106, 203
Pokorný P. 69
Pola R. 106, 115
Polednová H. 126
Ponomarov O. 110
Popelka A. 115, 208
Porschová H. 231
Porubská M. 199
Pospíšil R. 235

Pospíšilová A. 211
Potočňák I. 92
Poučková P. 122, 204
Přádný M. 101
Prášilová J. 220
Praus P. 191
Pravda M. 102, 193
Preininger O. 103
Preťo J. 208
Procházka M. 154
Procházková K. 84
Procházková L. 76
Procházková S. 181
Prokaiová M. 107
Prokeš L. 126, 155, 163
Prokop M. 136
Prokša M. 68
Proń A. 104
Prucek R. 78, 83, 87
Prysiazhnyi V. 184
Psotka M. 211
Puchoňová M. 181
Pukowiec A. 79
Pultar M. 234
Puterová Y. 186

R

Rábara L. 155
Rabyk M. 101
Račko D. 102
Rádl S. 215
Radoňák J. 166
Radvan R. 219, 221
Raindlová V. 77
Rak J. 168
Ranc V. 83, 87
Řanda Z. 148, 150
Rausseo L. C. C. 131
Reguli J. 118
Reiffers M. 186
Remeteiová D. 156, 157, 158, 161
Repko A. 190
Repovský D. 146, 156, 218
Řezanka P. 79, 147, 151
Řezanková H. 79
Řezníčková A. 182
Řezníčková E. 196
Riedl J. 77
Riemlová E. 91
Rievaj M. 80
Rimpelová S. 188, 200
Roh J. 195
Romero P. G. 75
Rostášová I. 94, 182
Roubalík M. 135
Rudášová M. 78
Ruhswurmová M. 234
Ruhswurmová N. 84
Ruml T. 200
Ruppenthalová L. 157
Růžička A. 91, 92, 93, 168, 175, 179, 210
Ružičková S. 156, 157, 161
Ryba T. 186
Rybakiewicz R. 104
Ryšavá H. 151

S

Šafařík Z. 129
Sajdl P. 178, 183
Samcová E. 145, 152
Sanetrník F. 69
Šarek J. 214
Schauer J. 137
Schmidt Š. 123, 124, 125, 129
Scholtzová E. 171
Ščudlová J. 212
Šebela M. 144, 149
Šebesta F. 74
Šebesta R. 198, 213
Sedláček O. 101, 213
Sedlák M. 109, 110, 196
Sedlaříková M. 75
Sedlářová I. 119, 234
Seemann L. 133
Seery T. A. P. 116
Šefčovičová J. 158
Segľa P. 99
Seilerová L. 73
Sekretár S. 123, 124, 125, 129
Semak V. 105
Semančíková J. 158
Semková B. 117
Serenčíšová J. 232
Šestáková I. 228
Šestauberová M. 228
Ševčík A. 134
Ševčík R. 97
Seymour L. W. 115
Sieberová V. 73
Siegel J. 182
Šiffalovič P. 192
Šilhánek J. 119
Šimbera J. 217
Šimek M. 218

Šimková L. 83
Šimon P. 159
Siposova K. 201
Šišková Machalová K. 160
Sivera M. 88
Šivová M. 208
Škantárová L. 159, 166
Skarmoutsou A. 114
Škoda D. 189
Škodová M. 122, 204
Sládková V. 71
Šlapáková P. 227, 231
Slavětínská R. 176
Slepička P. 178, 183, 204
Slezák M. 229
Šlouf M. 199
Šloufová I. 162
Slovák P. 160
Slušná L. 160
Smrčová M. 156, 157, 161
Šnita D. 136
Sofer Z. 168
Sopoušek j. 189
Sopuch T. 236
Soukup O. 206
Soukupová J. 69
Špaček J. 77
Spanik I. 142
Špániková L. 89, 90, 114
Spěváček J. 106
Špilovská K. 108, 208
Špírková M. 115
Špitálský Z. 81, 198
Šponiar M. 117
Špyrková E. 171, 173
Šrámková J. 145, 164
Stach M. 82
Štamberg K. 167
Štarha P. 96
Stávková K. 72
Stefaniuk A. 96
Štefelová J. 75, 162
Štěpánek P. 101, 116
Štěpánková Š. 221
Stolaříková J. 203
Štolcová M. 133, 134
Stříbrná D. 187
Stupavská M. 154, 160, 184
Šturdík E. 122
Stýskalík A. 189
Suchomel P. 221
Sukop S. 226
Šuľaková J. 74
Šulcová P. 138, 167, 168, 187
Sunde S. 131
Šutovská M. 194
Sutrová V. 162
Švec F. 213
Švihlová K. 163
Svítková J. 163
Svoboda L. 191
Švorc Ľ. 80, 163
Švorčík V. 147, 175, 178, 182, 183, 188, 204
Sýkora T. 221

T

Tabačiarová J. 81, 207
Takagi S. 169
Tarabová D. 205
Tisovský P. 213, 216
Tkáč J. 158
Tlili R. 81
Tmáková L. 123, 124, 125, 129
Toma Š. 185
Toman P. 104
Tomanová P. 213
Tomášová L. 214
Tomčík P. 80
Trávníček Z. 96
Trejbal J. 234, 235
Trenčanová M. 164
Trnková L. 150, 153, 165
Trojan J. 97, 98, 175, 185
Trojan M. 97, 98, 175
Trošanová Z. 140
Troška P. 78
Tůma P. 77, 152
Turan A. 132
Turjan J. 194
Turoňová Morovská A. 73
Tvrzník D. 136
Tydlitát J. 214

U

Uher M. 120
Uhlárová K. 78
Uhríková A. 221
Ulbrich K. 106
Urban M. 67
Urbanová I. 145, 164

V

Vacek J. 144, 149
Vaculíková L. 180
Vajíček S. 133
Valentin M. 114
Valentová H. 104
Valentová J. 186
Valha P. 147
Valigura D. 181
Valko M. 142, 159, 201
Valtusová M. 235
Vančo J. 96
Vaněk J. 97, 165
Vanko V. 115, 208
Varga R. 186
Vargová Z. 94, 182, 186
Vaskova Z. 100, 173, 181
Vatehová Z. 232
Vávra I. 185
Vavra M. 92
Vavřík J. 215
Vávrová 86
Vazač K. 135
Večeřa J. 187
Večeřová R. 87
Végh D. 102, 192, 202, 216
Vejpravová J. 190
Velebný V. 102, 193, 212
Velič D. 143, 146, 151, 154, 156, 160, 164, 218
Venanzi M. 194
Veselý J. 111
Veselý M. 183
Vetchý D. 235, 236
Vetrík M. 101, 122, 204
Větvička D. 122
Veverková L. 165
Vičar D. 128, 129
Vídenský J. 234
Vidláková P. 77
Vilémová M. 176
Vilková M. 107, 214
Vinklárek J. 94, 103, 187
Vinklárková L. 236
Vinšová J. 203
Vít J. 139
Vlačihová J. 229
Vlček J. 188
Vlčková B. 162
Vojtičková M. 216
Vontorová J. 232
Vosmanská V. 175, 188
Vraníková B. 236
Vranova E. 149
Vrbiková L. 123, 124, 125, 129
Vřešťál J. 189
Vykoukal V. 189
Vyskočil V. 72
Vysloužilová L. 69

W

Wawrzyczková I. 236
Weidlich T. 126, 128, 226
Wille E. E. 68
Wolfová L. 102, 193

Y

Yonath A. 67

Z

Zadinová M. 122, 204
Zagórska M. 104
Zajoncová L. 117, 225
Zákutná D. 190
Zámostný P. 130, 234
Zapala J. 104
Zapletal M. 235
Zbořil R. 78, 83, 86, 87, 160
Zeleňák V. 68, 99
Zelenka T. 75
Zelinka K. 217
Zemanová M. 86
Zemek F. 208
Židová P. 164
Zima J. 149
Zimmermann T. 217
Znaleziona J. 144, 149
Zobač O. 189
Žůrková J. 170
Zvonková M. 98, 185

PROGRAM PREDNÁŠOK

Sekcia 1: Analytická a fyzikálna chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (žltý farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20	**- 15:10**	**PP1**	**Miroslav Urban**
miestnosť Sekcie 1 žltá			SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE
14:20	**- 15:10**	**PP2**	**Filip Bureš**
miestnosť Sekcie 3 červená			HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH
15:10	*- 15:15*		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*
15:15	- 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**
			Predsedajúci: **P. Šimon**
15:25	- 15:50	1P01	L. Husáriková, K. M. Kaliňák, M. Mazúr
			NMR SPECTROSCOPY OF SLOVAK TOKAJ WINE
15:50	- 16:15	1P02	Veronika Sládková, Bohumil Kratochvíl
			VÝHODY A ÚSKALÍ JEDNOTLIVÝCH KOKRYSTALIZAČNÍCH TECHNIK
16:15	*- 16:45*		*Prestávka Občerstvenie*
			Predsedajúci: **M. Mazúr**
16:45	- 17:10	1P03	Vlastimil Vyskočil, Marta Blašková, Zuzana Hrochová, Zuzana Jurečková, Klára Stávková, and Andrea Hájková
			POTENTIOSTATIC DEPOSITION OF DNA – A TECHNIQUE FOR THE DEVELOPMENT OF HIGH-THROUGHPUT METHODS FOR THE DETECTION OF DNA DAMAGE
17:10	- 17:35	1P04	Miroslava Bobeničová, Dana Dvoranová
			SPECTROSCOPIC STUDY OF CAMPTOTHECIN DERIVATIVE SN-38
17:35	- 18:00	1P05	Lenka Seilerová, Bohumil Kratochvíl, Veronika Sieberová, Hana Brusová
			VYUŽITÍ A CHARAKTERIZACE SAMOEMULGUJÍCÍCH SYSTÉMU S LÉČIVY
18:00	*- 20:00*		*Večera*
20:00	- 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20 PP3 Eva E. Wille

miestnosť Sekcie 1 žltá — ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY

8:30 - 9:20 PP4 Vladimír Zeleňák

miestnosť Sekcie 3 červená — OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **M. Urban**

9:25 - 9:50 1P06 Renáta Oriňáková, Andrej Oriňák, Miriam Kupková, Monika Hrubovčáková, Andrea Fedorková, Andrea Morovská Turoňová
ŠTÚDIUM DEGRADÁCIE BIOLOGICKY ODBÚRATEĽNÝCH KOVOVÝCH MATERIÁLOV

9:50 - 10:15 1P07 Pavel Bartl, Jana Šuľaková, Jan John, Ferdinand Šebesta
SEPARACE AMERICIA Z KONCENTRÁTU KYSELINY BORITÉ Z ODPARKY PRIMÁRNÍHO OKRUHU JADERNÉ ELEKTRÁRNY DUKOVANY

10:15 - 10:40 1P08 Jana Jaklová Dytrtová, Michal Jakl
COPPER COMPLEXES WITH CYPROCONAZOLE SEPARATED USING ION MOBILITY

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúca: **R. Oriňáková**

11:10 - 11:35 1P09 Andrea Fedorková, Renáta Oriňáková, Marie Sedlaříková, Pedro Gómez-Romero
LÍTIUM-SÍRA-LiFePO4 NANOKOMPOZITNÝ KATÓDOVÝ MATERIÁL PRE Li/S BATÉRIE

11:35 - 12:00 1P10 Tomáš Zelenka, Jana Štefelová
SOUVISLOST MEZI MIKROPORÉZNÍMI CHARAKTERISTIKAMI UHLÍKATÝCH ADSORBENTŮ A JEJICH SCHOPNOSTÍ ADSORBOVAT PB(II) Z VODNÝCH ROZTOKŮ

12:00 - 12:25 1P11 Lenka Procházková, Václav Čuba
FOTOINDUKOVANÁ SYNTÉZA HEXAGONÁLNÍHO OXIDU ZINEČNATÉHO

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Po Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **P. Tomčík**

9:25 - 9:50 1P12 David Milde

ZABEZPEČENÍ KVALITY VÝSLEDKŮ VE VÝZKUMNÉ LABORATOŘI

9:50 - 10:15 1P13 Miroslav Fojta, Medard Plucnara, Pavlína Vidláková, Jan Špaček, Aleš Daňhel, Petr Orság, Petra Horáková, Hana Pivoňková, Jana Balintová, Petra Ménová, Veronika Raindlová, Hana Macíčková-Cahová, Jan Riedl, Luděk Havran, Michal Hocek

ZNAČENÍ DNA ELEKTROAKTIVNÍMI SKUPINAMI PRO BIOANALYTICKÉ APLIKACE

10:15 - 10:40 1P14 Petr Tůma, Klára Málková

NOVÉ METODY ELEKTROFORETICKÉHO STANOVENÍ NEUROTRANSMITERŮ

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **A. Oriňák**

11:10 - 11:35 1P15 Šárka Hradilová, Aleš Panáček, Robert Prucek, Libor Kvítek, Radek Zbořil

OPTIMALIZACE MINERALIZAČNÍ METODY BIOLOGICKÝCH VZORKŮ S OBSAHEM NANOČÁSTIC STŘÍBRA BEZ POUŽITÍ MIKROVLNNÉHO MINERALIZÁTORU

11:35 - 12:00 1P16 Marián Masár, Peter Troška, Ladislav Danč, Jasna Hradski, Drahoslava Kabátová, Katarína Uhlárová, Marína Rudášová, Róbert Bodor

ELEKTROSEPARÁCIE NA MIKROČIPOCH A ICH APLIKAčNý POTENCIÁL V ENVIRO- A BIOANALýZE

12:00 - 12:25 1P17 Pavel Řezanka, Jakub Koktan, Hana Řezanková, Pavel Matějka, Vladimír Král

POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PRO STANOVENÍ KONCENTRACE L-CYSTEINU A JEHO ENANTIOMERICKÉ ČISTOTY

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

15:10 - 15:15 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúca:**A. Fargašová**

15:15 - 15:40 1P18 Marek Mucha, Jiří Kalina, Adam Pukowiec

VÝVOJ A POUŽÍTÍ HPLC/MS METODY STANOVENÍ IBUPROFENU

15:40 - 16:05 1P19 Andrej Oriňák, Renáta Oriňáková, Branislav Erdelyi

HODNOTENIE AKTIVITY NANOROZMERNÝCH KATALYZÁTOROV PYROLÝZNOU PLYNOVOU CHROMATOGRAFIOU

16:05 -	16:30	1P20	Eva Culková, Peter Tomčík, Jaroslav Durdiak, Ľubomír Švorc, Miroslav Rievaj, Dušan Bustin, Ján Lokaj STANOVENIE ZINKU V ODPADOCH Z GUMÁRENSKÉHO PRIEMYSLU ELEKTROCHEMICKOU ROZPÚŠŤACOU ANALÝZOU NA ELEKTRÓDE Z DIAMANTU DOPOVANÉHO BÓROM
16:30 -	*17:00*		*Prestávka Občerstvenie*
			Predsedajúci: **D. Velič**
17:00 -	17:25	1P21	Ján Kratochvíla, Zdenko Špitálský, Daniela Jochec Mošková, Radhouan Tlili, Abderrahim Boudenne, Igor Krupa ELEKTRICKÉ, TEPELNÉ A DYNAMICKO MECHANICKÉ VLASTNOSTI POLYMÉRNYCH KOMPOZITOV NA BÁZE LDPE A EXPANDOVANÉHO GRAFITU
17:25 -	17:50	1P22	Jana Tabačiarová, Matej Mičušík, Pavol Fedorko, Mária Omastová MERANIE ELEKTRICKEJ VODIVOSTI A XPS ŠTÚDIUM STARNUTIA POLYPYROLU
17:50 -	18:15	1P23	Marek Stach, Anna Chovancová, Igor Lacík KINETIKA RADIKÁLOVEJ POLYMERIZÁCIE NEIONIZOVANEJ KYSELINY AKRYLOVEJ VO VODNEJ FÁZE
19:00 -	*24:00*		*Slávnostný večierok*

Piatok, 13. september 2013

			Predsedajúca: **Hradilová**
8:30 -	8:55	1P24	Ariana Fargašová, Robert Prucek, Václav Ranc, Aleš Panáček, Libor Kvítek, Radek Zbořil STUDIUM VLIVU KONCENTRACE CHLORIDOVÝCH IONTŮ NA INTENZITU POVRCHOVÉHO ZESÍLENÍ RAMANOVA SIGNÁLU ZA POUŽITÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA
8:55 -	9:20	1P25	Ludmila Šimková, Jiří Klíma, Jiří Ludvík (SPEKTRO) ELEKTROCHEMICKÉ STUDIUM NOVÉHO ENERGETICKÉHO MATERIÁLU FOX-7
9:20 -	9:45	1P26	Kamila Procházková, Jiří Krupka, Nikola Ruhswurmová KVANTIFIKACE VLIVU ROZPOUŠTĚDLA NA KINETIKU HYDROGENACE NITRILŮ
9:45 -	*10:15*		*Prestávka Občerstvenie*
10:15	10:40	2P27	Manová Alena, Beinrohr Ernest, Čacho František, Labuda Ján STANOVENIE KONCENTRÁCIE INDIA ROZPÚŠŤACOU CHRONOPOTENCIOMETRIOU
10:40	11:05	2P28	Mosinger Jiří, Henke Petr, Kubát Pavel FOTOAKTIVNÍ NANOVLÁKENNÉ MATERIÁLY
11:05 -	*11:10*		*Presun z miestností jednotlivých sekcií*
11:10 -	12:00		Panelová diskusia ako záver zjazdu
12:00 -	*14:00*		*Obed*

Sekcia 2: Anorganická a materiálová chémia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (modrý farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20 - 15:10	**PP1**	**Miroslav Urban**
miestnosť Sekcie 1 žltá		SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE
14:20 - 15:10	**PP2**	**Filip Bureš**
miestnosť Sekcie 3 červená		HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH
15:10 - 15:15		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*
15:15 - 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**
		Predsedajúca: **M. Zemanová**
15:25 - 15:50	2P01	Ján Híveš, Miroslav Gál, Marta Ambrová, Kamil Kerekeš
-		NOVÉ MOŽNOSTI ELEKTROLYTICKEJ PRÍPRAVY ŽELEZANOV Z TAVENÍN
15:50 - 16:15	2P02	Ondřej Kozák, Kateřina Holá, Kumara Kasibhatta Ramanatha Datta, Radek Zbořil
		FLUORESCENT CARBON DOTS
16:15 - 16:45		*Prestávka Občerstvenie*
		Predsedajúci: **J. Híveš**
16:45 - 17:10	2P03	Matilda Zemanová, Jana Vávrová, Ľudmila Krištofíková, Jana Kozánková
		MIKROBIÁLNE OVPLYVNENÁ KORÓZIA ZINKOVÝCH POVLAKOV
17:10 - 17:35	2P04	Michal Kamrádek, Jindřich Leitner
-		EXPERIMENTÁLNÍ A TEORETICKÉ STUDIUM ROVNOVÁHY SYSTÉMU Zn-Co-O
17:35 - 18:00	2P05	Aleš Panáček, Anna Balzerová, Robert Prucek, Václav Ranc, Renata Večeřová,Vendula Husičková, Jiří Pechoušek, Jan Filip, Radek Zbořil, Libor Kvítek
-		PŘÍPRAVA, CHARAKTERIZACE A STUDIUM ANTIMIKROBIÁLNÍCH VLASTNOSTÍ NANOKOMPOZITU Ag/PDDA-křemelina
18:00 - 20:00		*Večera*
20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20 PP3 Eva E. Wille

miestnosť Sekcie 1 žltá — ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY

8:30 - 9:20 PP4 Vladimír Zeleňák

miestnosť Sekcie 3 červená — OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **D. Ondrušová**

9:25 - 9:50 2P06 M. Pajtášová, D. Ondrušová, Z. Jankurová, K. Holcová, E. Jóna, J. Palieskova
THE APPLICATION OF FILLERS BASED ON MODIFIED CLAY MATERIALS IN RUBBER COMPOUNDS

9:50 - 10:15 2P07 Martin Sivera, Libor Kvítek, Aleš Panáček
SYNTÉZA A OVLIVNĚNÍ VLASTNOSTÍ NANOČÁSTIC STŘÍBRA PŘÍRODNÍMI LÁTKAMI

10:15 - 10:40 2P08 Martina Karlíková, Libor Kvítek, Aleš Panáček, Jan Filip, Jiří Pechoušek
PŘÍPRAVA A KATALYTICKÉ VLASTNOSTI NANOAG@MMT KOMPOZITNÍHO MATERIÁLU

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **M. Pajtášová**

11:10 - 11:35 2P09 D. Ondrušová, M. Pajtášová, L. Špániková, S. Domčeková, M. Ďurčeková
RUBBER ADDITIVES, THEIR INFLUENCE ON RUBBER PROPERTIES AND ENVIRONMENTAL ASPECTS OF PRODUCTION

11:35 - 12:00 2P10 Lenka Špániková, Darina Ondrušová, Slavomíra Domčeková, Mária Kopcová, Katarína Holcová
THE NANOFILLERS ON THE BASIS OF NATURAL AND SYNTHETIC ZEOLITE AND THEIR INFLUENCE ON PROPERTIES OF THE RUBBER COMPOUNDS

12:00 - 12:25 2P11 Martin Mucha
MAGNETICKÉ KOMPOZITY NA BÁZI BENTONITU A JEJICH STABILITA V KYSELÉM PROSTŘEDÍ

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **J. Moncoľ**

9:25 - 9:50 2P12 Hana Kampová, Emilie Riemlová, Jitka Klikarová, Vladimír Pejchal, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička

HYBRIDNÍ AMINO-AMIDY - NOVÉ N,N'-CHELATUJÍCÍ LIGANDY PRO KOVY HLAVNÍCH SKUPIN

9:50 - 10:15 2P13 Alan Liška, Jiří Ludvík

KOMPLEXOTVORNÉ VLASTNOSTI OLIGONITROKALIX[4]ARENŮ

10:15 - 10:40 2P14 Martin Vavra, Ivan Potočňák

KRYŠTÁLOVÉ ŠTRUKTÚRY A SPEKTRÁLNO-ŠTRUKTÚRNE KORELÁCIE V TETRAKYANIDOPLATNATANOCH MEDI

10:40 - 11:10 — *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **Z. Vargová**

11:10 - 11:35 2P15 Tomáš Chlupatý, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička

AMIDINAT VS. GUANIDINAT CÍNATÝ– OXIDACE A 4+1 OXIDATIVNÍ CYKLOADICE

11:35 - 12:00 2P16 Roman Olejník, Zdeňka Padělková, Aleš Růžička

BIFUNKČNÍ β-DIKETIMINÁTOVÉ A ENANAMINONOVÉ KOMPLEXY KOVŮ

12:00 - 12:25 2P17 M. Křižan, M. Erben, J. Vinklárek a Z. Padělková

LINEÁRNÍ A NELINEÁRNÍ PSEUDOHALOGENIDOVÉ DERIVÁTY BIS(CYKLOPENTADIENYL)TITANITÉ

12:30 - 14:20 — *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

15:10 - 15:15 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **A. Růžička**

15:15 - 15:40 2P18 Zuzana Vargová, Ingrida Rostášová, Katarína Györyová, Petr Hermann, Ivan Lukeš

MOLEKULOVÉ ROZPOZNÁVANIE MALÝCH BIOMOLEKÚL POMOCOU KOMPLEXU

Zn^{2+}-CYKLÉN

15:40 - 16:05 2P19 Tomasz Michalowski, Wojciech Grochala

FILLING THE GAPS - NOVEL SALTS OF HSO3F SUPERACID

16:05 - 16:30 2P20 Anna Stefaniuk, Jarosław Jung, Ireneusz Głowacki

PHOTOGENERATION OF CHARGE CARRIERS IN POLY(N-

VINYLCARBAZOLE) DOPED WITH 2,4,7-TRINITROFLUORENONE AND TRIS(2-PHENYLPYRIDINE) IRIDIUM

16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **M. Erben**

17:00 - 17:25 2P21 Pavel Štarha, Ján Vančo, Zdeněk Dvořák, Zdeněk Trávníček
PROTINÁDOROVĚ AKTIVNÍ PLATNATÉ KOMPLEXY S DERIVÁTY 7-AZAINDOLU

17:25 - 17:50 2P22 Radek Ševčík, Jakub Vaněk, Přemysl Lubal Zuzana Kotková, Jan Kotek, Petr Hermann
STUDIUM KINETICKÝCH A TERMODYNAMICKÝCH VLASTOSTÍ KOVOVÝCH KOMPLEXŮ S MODIFIKOVANÝMI TETRAAZAMAKROCYKLICKÝMI LIGANDY

17:50 - 18:15 2P23 Petra Luňáková, Miroslav Trojan, Jakub Trojan
SYNTÉZA PEROVSKITŮ TYPU BaSn1-x-yTbxZryO3

19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 13. september 2013

Predsedajúci: **J. Moncoľ**

8:30 - 8:55 2P24 Ivan Němec, Irena Matulková, Michaela Fridrichová, Jana Mathauserová, Matouš Kloda, Petr Němec, Ivana Císařová
HYDROGEN BONDED MOLECULAR CRYSTALS - PROSPECTIVE NOVEL NLO MATERIALS

8:55 - 9:20 2P25 Marcela Zvonková, Jana Luxová, Jakub Trojan, Miroslav Trojan
$CaSnSiO_5$ S PŘÍDAVKEM CHROMU

9:20 - 9:45 2P26 Miroslav Almáši, Vladimír Zeleňák, Róbert Gyepes, Juraj Kuchár, Jiří Čejka
SORPČNÉ VLASTNOSTI A KATALYTICKÁ AKTIVITA NOVÝCH ZLÚČENÍN TYPU METAL-ORGANIC FRAMEWORKS

9:45 - 10:15 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **I. Němec**

10:15 10:40 2P27 Vladimír Kuchtanin, Jan Moncoľ, Peter Segľa
STUDY OF COPPER(II) THIOPHENECARBOXYLATE COMPLEXES WITH PYRIDINE AND METHYLPYRIDINE

10:40 11:05 2P28 Ján Moncoľ, Jozef Halaška, Zuzana Vasková
STRUCTURAL VARIABILITY AND SUPRAMOLECULAR ISOMERISM OF COPPER(II) CARBOXYLATES WITH N-METHYLNICOTINAMIDE

11:05 - 11:10 *Presun z miestností jednotlivých sekcií*

11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 3: Organická chémia a polyméry

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (červený farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20 - 15:10	**PP1**	**Miroslav Urban**	
miestnosť Sekcie 1 žltá		SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE	
14:20 - 15:10	**PP2**	**Filip Bureš**	
miestnosť Sekcie 3 červená		HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH	
15:10 - 15:15		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*	
15:15 - 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**	
		Predsedajúca: **M. Omastová**	
15:25 - 15:50	3P01	Martin Hrubý, Jan Kučka, Jiří Pánek, Hana Macková, Sergey K. Filippov, Anna Yu. Bogomolova, Ondřej Sedláček, Mariia Rabyk, Richard Hoogenboom, Bryn Monnery, Andrès Ciolino, Petr Štěpánek	
-		TERMORESPONSIVNÍ POLYMERNÍ MICELY A NANOČÁSTICE: POTENCIÁLNÍ NOSIČE RADIOFARMAK	
15:50 - 16:15	3P02	Miroslav Vetrík, Sergej Filiposv, Ondrej Sedláček, Martin Přádný, Petr Štepánek, Martin Hrubý	
		TERMORESPONSIVNÍ POLYMERNÍ MICELY A NANOČÁSTICE: POTENCIÁLNÍ NOSIČE RADIOFARMAK	
16:15 - 16:45		*Prestávka Občerstvenie*	
		Predsedajúci: **M. Hrubý**	
16:45 - 17:10	3P03	Martin Danko, Anita Andicsová, Pavol Hrdlovič, Dušan Račko, Daniel Végh, Vladimír Lukeš	
		CARBONYL SUBSTITUTED BITHIOPHENE DERIVATIVES – SPECTRAL STUDIES IN SOLUTION AND POLYMER MATRICES	
17:10 - 17:35	3P04	Lucie Wolfová, Martin Pravda, Julie Bystroňová, Vladimír Velebný	
-		HYDROGELY NA BÁZI KYS. HYALURONOVÉ A JEJICH VYUŽITÍ V TKÁŇOVÉM INŽENÝRSTVÍ	
17:35 - 18:00	3P05	O. Preininger, J. Honzíček, J. Vinklárek, M. Erben	
-		VLIV (η3-ALLYL)-(η5-CYKLOPENTADIENYL)-DIKARBONYLMOLYBDENATÉHO KOMPLEXU NA TVORBU FILMU OXOPOLYMERAČNĚ ZASYCHAJÍCÍHO POJIVA NÁTĚROVÉ HMOTY	
18:00 - 20:00		*Večera*	
20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04	

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20 PP3 Eva E. Wille

miestnosť Sekcie 1 žltá — ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY

8:30 - 9:20 PP4 Vladimír Zeleňák

miestnosť Sekcie 3 červená — OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **J. Podešva**

9:25 - 9:50 3P06 Kamil Kotwica, Ewa Kurach, Renata Rybakiewicz, Joanna Zapala, Marek Knor, Robert Nowakowski, David Djurado, Petr Toman , Jiri Pfleger, Małgorzata Zagórska, Adam Proń

EFFECT OF ALKYL SUBSTITUENTS ON SPECTROSCOPIC, REDOX AND STRUCTURAL PROPERTIES OF 2,5-BIS(2,2'-BITHIOPHENE-5-YL)-1,3,4-THIADIAZOLE

9:50 - 10:15 3P07 Juraj Kronek, Jozef Lustoň, Angela Kleinová, Ivica Janigová, Jan Nedbal, Helena Valentová

VYUŽITIE POLYADIČNEJ REAKCIE 2-OXAZOLÍNOV NA PRÍPRAVU POLYMÉROV SO ŠPECIFICKÝMI TERMICKÝMI VLASTNOSŤAMI

10:15 - 10:40 3P08 Zuzana Kroneková, Juraj Kronek, Gabriela Kolláriková, Vladislav Semak, Peter Kasák, Igor Lacík

ŠTÚDIUM CYTOTOXICITY POLYMÉRNYCH MATERIÁLOV PRE VYUŽITIE V BIOMEDICÍNE

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **J. Kronek**

11:10 - 11:35 3P09 Jiří Podešva, Jiří Spěváček, Pavel Kratochvíl, Miloš Netopilík

VĚTVENÍ SILNÝCH POLYELEKTROLYTŮ ZÍSKANÝCH KOPOLYMERIZACÍ VINYLOVÝCH A DIVINYLOVÝCH MONOMERŮ VE VODNÉM PROSTŘEDÍ. 1H NMR ANALÝZA

11:35 - 12:00 3P10 Michal Pechar, Robert Pola, Alena Braunová, Richard Laga, Karel Ulbrich

COMBINATION OF CLICK CHEMISTRY AND CONTROLLED RADICAL POLYMERIZATION FOR SYNTHESIS OF ADVANCED POLYMER DRUG DELIVERY SYSTEMS

12:00 - 12:25 3P11 Anna Kundys, Andrzej Plichta, Anita Jóźwiak, Zbigniew Florjańczyk

ACETYLACETONATES OF VARIOUS METALS AS EFFICIENT CATALYSTS OF THE POLYMERIZATION OF L-LACTIDE INITIATED WITH MACRODIOLS

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **M. Sedlák**

9:25 - 9:50 3P12 Ján Imrich, Mária Vilková, Marianna Prokaiová

NOVÉ SPIROCYKLY NA BÁZE AKRIDIN-9-YLMETYLAMÍNU

9:50 - 10:15 3P13 Slávka Hamuľaková, Katarína Špilovská, Martina Hrabinová, Ladislav Janovec, Kamil Kuča, Ján Imrich

SYNTÉZA A BIOLOGICKÁ ÚČINNOSŤ TAKRIN-KUMARINOVÝCH ANALÓGOV AKO POTENCIÁLNYCH LIEČIV ALZHEIMEROVEJ CHOROBY

10:15 - 10:40 3P14 Eva Mezeiová, Miroslava Martinková, Dominika Jacková, Jozef Gonda

STEREOSELEKTÍVNA SYNTÉZA JASPÍNU B A JEHO ANALÓGOV

10:40 - 11:10 — *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **J. Imrich**

11:10 - 11:35 3P15 Miloš Sedlák, Dattatry Bhosale, Jiří Palarčík, Aleš Imramovský

SYNTÉZA A CHARAKTERIZACE SMĚROVANÉHO KONJUGÁTU ISONIAZIDU S MAGNETICKÝMI NANOČÁSTICEMI

11:35 - 12:00 3P16 Jiří Hanusek, Oleksandr Ponomarov

1,2,4-DITHIAZOLY JAKO ÚČINNÁ SULFURIZAČNÍ ČINIDLA P(III) SLOUČENIN

12:00 - 12:25 3P17 Pavel Drabina, Miloš Sedlák

PYRIDINYL-IMIDAZOLIDINONY JAKO ENANTIOSELEKTIVNÍ KATALYZÁTORY HENRYHO REAKCE

12:30 - 14:20 — *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

15:10 - 15:15 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **P. Pazdera**

15:15 - 15:40 3P18 Josef Hájíček

DEVELOPMENT OF GENERIC APIS: (-)-EZETIMIBE AND (-)-TAPENTADOL

15:40 - 16:05 3P19 Martin Kamlar, Jan Veselý

VYUŽITÍ SLOUČENIN HYPERVALENTNÍHO JÓDU V ASYMETRICKÉ ORGANICKÉ SYNTÉZE

16:05 - 16:30 3P20 Kristína Plevová, Jana Jarčušková, Viktor Milata, Jela Mistríková

SYNTÉZA, VLASTNOSTI A BIOLOGICKÁ AKTIVITA NOVÝCH KYNURÉNOVÝCH KYSELÍN

16:30 - 17:00 — *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **J. Hájíček**

17:00 - 17:25 3P21 Pavel Pazdera, Eva Havránková, Dana Němečková
CERITÉ KATIONTY JAKO ÚČINNÝ KATALYZÁTOR SYNTÉZ ZA ÚČASTI SLOUČENIN S KARBONYLOVOU A OBDOBNOU FUNKČNÍ SKUPINOU [1]

17:25 - 17:50 3P22 Dana Němečková, Pavel Pazdera
PŘÍMÁ N1-MONOSUBSTITUCE NA PIPERAZINU

17:50 - 18:15 3P23 Miroslav Kríž
RASTLINNÉ A ŽIVOČÍŠNÉ TOXÍNY OKOLO NÁS

19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 13. september 2013

Predsedajúci: **M. Danko**

8:30 - 8:55 3P24 Marian Valentin, Amalia Skarmoutsou, Mária Omastová, Costas .A. Charitidis, Igor Krupa
NANOMECHANICKÉ VLASTNOSTI EXTRUDOVANEJ PLA FÓLIE POVRCHOVO MODIFIKOVANEJ VZDUŠNOU A ARGÓNOVOU PLAZMOU

8:55 - 9:20 3P25 Slavomíra Domčeková, Darina Ondrušová, Lenka Špániková, Zuzana Jankurová
THE REINFORCING EFFECT OF ALTERATIVE FILLER IN RUBBER COMPOUNDS

9:20 - 9:45 3P26 Richard Laga, Geoffrey M. Lynn, Petr Chytil, Gray Kueberuwa, Anna Lagová, Michal Pechar, Robert Pola, Tomáš Etrych, Len W. Seymour
SYNTHETIC POLYMER ADJUVANTS AS NOVEL IMMUNOSTIMULANTS FOR VACCINATION PURPOSES

9:45 - 10:15 *Prestávka Občerstvenie*

10:15 10:40 3P27 Igor Novák, Anton Popelka, Ivan Chodák, Milena Špírková, Angela Kleinová, Vladimír Vanko
ANTIBACTERIAL POLYETHYLENE PREPARED BY PLASMA TREATMENT

10:40 11:05 3P28 Petr Štěpánek, Sergey K. Filippov, Thomas A.P. Seery, Peter Černoch, Martin Hrubý, Jaroslav Kříž, Jiří Pánek
DYNAMICKÉ VLASTNOSTÍ POLYELEKTROLYTŮ V ZÁVISLOSTI NA DIELEKTRICKÉ KONSTANTĚ ROZPOUŠTĚDLA A VELIKOSTI PROTIIONTU

11:05 - 11:10 *Presun z miestností jednotlivých sekcií*

11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 4: Vyučovanie a história chémie

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (fialový farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20 - 15:10	**PP1**	**Miroslav Urban**	
miestnosť Sekcie 1 žltá		SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE	
14:20 - 15:10	**PP2**	**Filip Bureš**	
miestnosť Sekcie 3 červená		HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH	
15:10 - 15:15		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*	
15:15 - 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**	
		Predsedajúci: **J. Reguli**	
15:25 - 15:50	4P01	Katarína Javorová, Beáta Brestenská, Martin Šponiar	
-		KVALITNÝ A INOVATÍVNY UČITEĽ V ŠKOLE DNEŠKA A BUDÚCNOSTI	
15:50 - 16:15	4P02	Ludmila Zajoncová	
		JAK ZVÝŠIT ZÁJEM STUDENTŮ STŘEDNÍCH ŠKOL O STUDIUM PŘÍRODOVĚDNÝCH OBORŮ?	
16:15 - 16:45		*Prestávka Občerstvenie*	
16:45 - 17:10	4P03	Beáta Semková	
		POPULARIZÁCIA CHÉMIE NA GYMNÁZIU PAVLA HOROVA V MICHALOVCIACH	
17:10 - 17:35	4P04	Jana Tavelová	
-		AKTIVITY NA GYMNÁZIU VILIAMA PAULINYHO TÓTHA V MARTINE V OBLASTI CHÉMIE	
17:35 18:00	4P05	Juraj Malinčík	
		BUDÚCNOSŤ CHEMICKEJ OLYMPIÁDY NA SLOVENSKU	
18:00 - 20:00		*Večera*	
20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04	

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20	**PP3**	**Eva E. Wille**
miestnosť Sekcie 1 žltá		ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY
8:30 - 9:20	**PP4**	**Vladimír Zeleňák**
miestnosť Sekcie 3 červená		OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM
9:20 - 9:25		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*
9:50 - 10:15		
10:15 - 10:40		
10:40 - 11:10		*Prestávka Občerstvenie*
11:10 - 11:35		
12:30 - 14:20		*Obed*
14:20 - 18:00		*Výlety*
18:00 - 20:00		*Večera*
20:00 - 24:00		Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **M. Prokša**

9:25 - 9:50 4P06 Ján Reguli

CHÉMIA PRE CHEMIKOV VERZUS CHÉMIA PRE NECHEMIKOV? MÔŽE BYŤ OBSAH PREDMETU CHÉMIA ROZDIELNY NA RÔZNYCH STREDNÝCH ŠKOLÁCH?

9:50 - 10:15 4P07 Jaroslav Šilhánek

SCIFINDER A REAXYS - POROVNÁNÍ DVOU NEJDŮLEŽITĚJŠÍCH CHEMICKÝCH BÁZÍ DAT

10:15 - 10:40 4P08 Ivona Sedlářová, Karel Bouzek, Vlastimil Fíla

EM^{3}E – ZKUŠENOSTI S PŘÍPRAVOU A DVĚMA ROKY REALIZACE PROJEKTU ERASMUS MUNDUS

10:40 - 11:10 — *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **M. Prokša**

11:10 - 11:35 4P09 Milan Melicherčík, Danica Melicherčíková

VÝZNAMNÝ CHEMICI A VÝUČBA CHÉMIE

11:35 - 12:00 4P10 Michal Uher, Viktor Milata

VYDAVATEĽSKÁ ČINNOSŤ SLOVENSKEJ CHEMICKEJ SPOLOČNOSTI OD ROKU 1948 DO ROKU 2013

12:00 - 12:25 4P11 Ján Čaplovič

ANGLICKÝ CHEMIK J. G. F. DRUCE (1894 – 1950) A JEHO VZŤAH K ČESKOSLOVENSKU

12:30 - 14:20 — *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

Piatok, 13. september 2013

11:10 - 12:00 — Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 — *Obed*

Sekcia 5: Potravinárstvo, životné prostredie a biotechnológia

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (oranžový farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20 - 15:10	**PP1**	**Miroslav Urban**	
miestnosť Sekcie 1 žltá		SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE	
14:20 - 15:10	**PP2**	**Filip Bureš**	
miestnosť Sekcie 3 červená		HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH	
15:10 - 15:15		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*	
15:15 - 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**	
		Predsedajúci: **Š. Schmidt**	
15:25 - 15:50	5P01	Ciesarová Z., Kukurová K., Marková L., Fencl J.	
-		ELIMINÁCIA AKRYLAMIDU V SUŠIENKACH APLIKÁCIOU ASPARAGINÁZY	
15:50 - 16:15	5P02	Mikušová L., Šturdík E.	
		CEREAL-BASED FOOD PRODUCTS AND THEIR ROLE IN THE PREVENTION OF CIVILISATION DISEASE	
16:15 - 16:45		*Prestávka Občerstvenie*	
		Predsedajúca: **Z. Ciesarová**	
16:45 - 17:10	5P03	Mattová J., Větvička D., Hrubý M., Kučka J., Králová J., Poučková P., Zadinová M., Škodová M., Vetrík M., Petřík M., Nový Z., Beneš J.	
		CHELATUJÍCÍ MAKROPORÉZNÍ MIKROČÁSTICE JAKO POTRAVINOVÝ DOPLNĚK PRO LÉČBU WILSONOVY CHOROBY	
17:10 - 17:35	5P04	Mastihuba V., Mastihubová M., Chyba A.	
		SYNTETICKÉ SUBSTRÁTY HYDROXYCINAMOYLESTERÁZ PRE SCREENING A BIOKATALÝZU	
17:35 - 18:00	5P05	Sekretár S., Tmáková L., Hlásniková J., Vrbiková L., Kreps F., Schmidt Š.	
-		CHEMIKÁLIE Z POTRAVINÁRSKEJ BIOMASY	
18:00 - 20:00		*Večera*	
20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04	

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20 PP3 Eva E. Wille

miestnosť Sekcie 1 žltá — ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETY

8:30 - 9:20 PP4 Vladimír Zeleňák

miestnosť Sekcie 3 červená — OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **V. Mastihuba**

9:25 - 9:50 5P06 Hlásniková J., Cimermanová T., Sekretár S., Tmáková L., Vrbiková L., Schmidt Š.
VPLYV OBALOVÉHO MATERIÁLU NA OXIDAČNÚ STABILITU TUKOV PRI ICH OHREVE

9:50 - 10:15 5P07 Kreps F., Schmidt Š., Kyselka J., Filip V.
VPLYV RAFINÁCIE REPKOVÉHO OLEJA NA OBSAH TOKOFEROLOV

10:15 - 10:40 5P08 Vrbiková L., Schmidt Š., Kreps F., Tmáková L., Hlásniková J., Sekretár S.
SLEDOVANIE ZMIEN V OXIDAČNEJ STABILITE SLNEČNICOVÝCH OLEJOV

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **S. Sekretár**

11:10 - 11:35 5P09 Schmidt Š.
VÝZNAM POTRAVINÁRSKYCH TUKOV VO VÝŽIVE ČLOVEKA

11:35 - 12:00 5P10 Schmidt Š.
ALTERNATÍVNE ZDROJE RASTLINNÝCH OLEJOV Z BIOMASY

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **I. Mašek**

9:25 - 9:50 5P11 Musilová I., Weidlich T., Mikulášek P.

VYUŽITÍ FLOKULANTŮ MODIFIKOVANÝCH HUMINOVÝCH KYSELIN PRO ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD

9:50 - 10:15 5P12 Polednová H., Weidlich T., Mikulášek P.

VYUŽITÍ SORBENTŮ PŘI ČIŠTĚNÍ ODPADNÍCH VOD Z VÝROBY BARVIV

10:15 - 10:40 5P13 Weidlich T., Krchová L., Prokeš L.

REDUKTIVNÍ DEHALOGENACE VE VODNÉM ROZTOKU JAKO METODA BEZPEČNÉ DEGRADACE HALOGENOVANÝCH AROMATICKÝCH SLOUČENIN

10:40 - 11:10 — *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **Z. Šafařík**

11:10 - 11:35 5P14 Dušek L., Balcar L., Horňáková B.

NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE ODPADNÍCH A PROCESNÍCH ODPADNÍCH VOD – MOŽNOSTI A OMEZENÍ ELEKTRO-FENTONOVY REAKCE

11:35 12:00 5P15 Horňáková B., Dušek L., Novotný L., Chýlková J., Bandžuchová L.

NEPŘÍMÁ ELEKTROCHEMICKÁ OXIDACE VYBRANÝCH AMINOANTRACHINONOVÝCH A KATIONAKTIVNÍCH BARVIV

12:00 12:25 5P16 Martinková J., Weidlich T., Mikulášek P.

POROVNÁNÍ ÚROVNĚ ZNEČIŠTĚNÍ U ZÍSKANÝCH FILTRÁTŮ ZE SRÁŽENÍ REAKTIVNÍCH BARVIV IONTOVÝMI KAPALINAMI NA ZÁKLADĚ SROVNÁNÍ UKAZATELŮ CHSKCr, BSK5 a AOX

12:30 - 14:20 — *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

15:10 - 15:15 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **L. Dušek**

15:15 - 15:40 5P17 Mašek I., Vičar D.

KONTAMINACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NA SLOVENSKU ZPŮSOBENÁ ČINNOSTÍ SOVĚTSKÉ ARMÁDY

15:40 16:05 5P18 Šafařík Z., Vičar D.

DEVASTACE ŽIVOTNÍHO PROSTŘEDÍ NĚKTERÝCH ÚZEMÍ STŘEDNÍHO SLOVENSKA SOVĚTSKOU ARMÁDOU A SOUČASNÁ REALIZOVANÁ OPATŘENÍ

16:05 16:30 5P19 Tmáková L., Sekretár S., Hlásniková J., Vrbiková L., Schmidt Š.
SLEDOVANIE POVRCHOVO AKTÍVNYCH VLASTNOSTÍ FYTOCHEMIKÁLIÍ ZO ZDROJOV BIOMASY

16:30 - 17:00 *Prestávka Občerstvenie*

17:00 - 18:15

19:00 - 24:00 *Slávnostný večierok*

Piatok, 13. september 2013

11:10 - 12:00 Panelová diskusia ako záver zjazdu

12:00 - 14:00 *Obed*

Sekcia 6: CHEMPROGRESS

Miestnosť: podľa plánu miestností na obálke (zelený farebný kód)

Utorok, 10. september 2013

14:20 - 15:10	**PP1**	**Miroslav Urban**	
miestnosť Sekcie 1 žltá		SPOLUPRÁCA EXPERIMENTU A POČÍTAČOVEJ CHÉMIE: ELEKTRÓNOVÁ AFINITA URACILU A ĎALŠIE APLIKÁCIE	
14:20 - 15:10	**PP2**	**Filip Bureš**	
miestnosť Sekcie 3 červená		HETEROCYKLICKÉ AKCEPTORNÍ JEDNOTKY V PUSH-PULL CHROMOFORECH	
15:10 - 15:15		*Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*	
15:15 - 15:25		**Úvodná informácia garanta sekcie**	
		Predsedajúci: **P. Zámostný**	
15:25 - 15:50	6P01	Boris Jambor, Elena Hájeková, Martin Bajus	
-		TERMICKÉ KRAKOVANIE POLYALKÉNOVÝCH ODPADOV	
15:50 - 16:15	6P02	Petr Zámostný, Adam Karaba, Natália Olahová, Jiří Petrů, Jan Patera, Elena Hájeková, Martin Bájus a Zdeněk Bělohlav	
		OPTIMALIZACE KINETICKÝCH PARAMETRŮ PYROLÝZY UHLOVODÍKŮ VE ZOBECNĚNÉM MATEMATICKÉM MODELU	
16:15 - 16:45		*Prestávka Občerstvenie*	
		Predsedajúci: **K. Bouzek**	
16:45 - 17:10	6P03	Karel Bouzek, Martin Paidar	
		VODÍKOVÁ EKONOMIKA A JEJÍ ROLE V ENERGETICE	
17:10 - 17:35	6P04	Jakub Mališ, Luis Cesar Colmenares Rausseo, Svein Sunde, Karel Bouzek	
-		POROVNÁNÍ STABILITY PLATINOVÝCH A PLATINUM-KOBALTOVÝCH KATALYZÁTORŮ PRO PALIVOVÉ ČLÁNKY TYPU PEM	
17:35 - 18:00	6P05	Roman Kodým, Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek	
-		MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ PROCESU VÝROBY VODÍKU VYSOKOTEPLOTNÍ ELEKTROLÝZOU VODNÍ PÁRY	
18:00 - 20:00		*Večera*	
20:00 - 24:00	Po	Posterové prezentácie: 1Po01-1Po26, 2Po01-2Po24, 3Po01-3Po25, 4Po01-4Po05, 5Po01-5Po10, 6Po01-6Po04	

Streda, 11. september 2013

8:30 - 9:20 PP3 Eva E. Wille

miestnosť Sekcie 1 žltá — ChemPubSoc EUROPE AND SLOVAK CHEMICAL SOCIETYs

8:30 - 9:20 PP4 Vladimír Zeleňák

miestnosť Sekcie 3 červená — OD PÓROVITÝCH KOORDINAČNÝCH POLYMÉROV A USPORIADANÝCH PÓROVITÝCH OXIDOV K MULTIFUNKČNÝM NANOPÓROVITÝM MATERIÁLOM

9:20 - 9:25 *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: A**. Kaszonyi**

9:25 - 9:50 6P06 Andrej Turan, Dušan Mravec, Alexander Kaszonyi
ETHERIFICATION OF GLYCEROL BY TERT.BUTYL ALKOHOL IN FLOW REACTOR

9:50 - 10:15 6P07 László Seemann, Alexander Kaszonyi, Lívia Lépesová
KINETICS STUDY OF THE REACTION OF GLYCEROL AND UREA TO GLYCEROL CARBONATE

10:15 - 10:40 6P08 Stanislav Vajíček, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi
PD-BI NANOPARTICLES FOR OXIDATION OF BIOGLYCEROL IN FIXED-BED REACTOR

10:40 - 11:10 *Prestávka Občerstvenie*

Predsedajúci: **J. Kronek**

11:10 - 11:35 6P09 Andrej Ševčík, Alexander Kaszonyi
INDIUM PROMOTED COPPER AND NICKEL BASED CATALYSTS FOR HYDROGENOLYSIS OF GLYCEROL

11:35 - 12:00 6P10 Veronika Hergelová, Magdaléna Štolcová, Alexander Kaszonyi
SELECTIVE CATALYTIC OXIDATION OF BIOMASS-DERIVED ALKANE TO ALKOHOL AND ALDEHYDE

12:00 - 12:25 6P11 Jiří Krupka
MECHANISMUS POVRCHOVÝCH REAKCÍ PROBÍHAJÍCÍCH PŘI HYDROGENACI NITRILŮ NA KOVOVÝCH KATALYZÁTORECH

12:30 - 14:20 *Obed*

14:20 - 18:00 *Výlety*

18:00 - 20:00 *Večera*

20:00 - 24:00 Posterové prezentácie: 1Po27-1Po53, 2Po25-2Po47, 3Po26-3Po50, 4Po06-4Po09, 5Po11-5Po21, 6Po5-6Po09

Štvrtok, 12. september 2013

8:30 - 9:20 PP5 Miroslav Prokša

miestnosť Sekcie 1 žltá — STAV A VÝVOJOVÉ TRENDY VYUČOVANIA CHÉMIE V DIDAKTICKEJ TEÓRII A PRAXI

8:30 - 9:20 PP6 Igor Bodík

miestnosť Sekcie 3 červená — ANAERÓBNA FERMENTÁCIA KUCHYNSKÝCH ODPADOV - POTENCIÁLNY ZDROJ ENERGIE

9:20 - 9:25 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

Predsedajúci: **M. Bajus**

9:25 - 9:50 6P12 Karel Vazač, Martin Paidar, Martin Roubalík, Karel Bouzek
OPTIMALIZACE PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY S KATEXOVOU MEMBRÁNOU

9:50 - 10:15 6P13 Martin Prokop, Tomáš Bystroň, Karel Bouzek
ELEKTROCHEMICKÁ SYNTÉZA ŽELEZANU S VYUŽITÍM INERTNÍ ANODY

10:15 - 10:40 6P14 Michal Němeček, Roman Kodým, David Tvrzník, Karel Bouzek, Dalimil Šnita
STUDIUM ROVNOMĚRNOSTI DISTRIBUCE ELEKTRICKÉHO PROUDU V PILOTNÍ ELEKTRODIALÝZNÍ JEDNOTCE

10:40 - 11:10 — *Prestávka Občerstvenie*

11:10 - 11:35 6P15 Filip Karas, Martin Paidar, Karel Bouzek
VLIV VYBRANÝCH PARAMETRŮ NA IONTOVOU VODIVOST YSZ ELEKTROLYTU

11:35 - 12:00 6P16 Jaromír Hnát, Martin Paidar, Jan Schauer, Karel Bouzek
VLIV KAPALNÉHO ELEKTROLYTU NA PROVOZNÍ VLASTNOSTI ANION SELEKTIVNÍHO POLYMERNÍHO ELEKTROLYTU V PROCESU ALKALICKÉ ELEKTROLÝZY VODY

12:00 - 12:25 6P17 Petra Šulcová, Jiří Málek
AKTIVITY ČESKÉ ODBORNÉ SKUPINY TERMICKÉ ANALÝZY

12:30 - 14:20 — *Obed*

14:20 - 15:10 PP7 Martin Bajus

miestnosť Sekcie 1 žltá — DRUHÁ GENERÁCIA BIOPALÍV A CHEMIKÁLIÍ Z TERMICKÝCH A KATALYTICKÝCH PREMIEN BIOMASY

14:20 - 15:10 PP8 David Lukáš

miestnosť Sekcie 3 červená — NOVÉ VARIANTY ELEKTROSTATICKÉHO ZVLÁKŇOVÁNÍ

15:10 - 15:15 — *Presun z pozvaných prednášok do miestností jednotlivých sekcií*

15:15 - 15:40 6P18 Ladislav Kudrlička, Jiřina Čežíková Petr Pistulka, Vladimír Plucha, Martin Paidar
IZOLACE THALLIA A JEHO SLOUČENIN Z ODPADNÍCH VOD

15:40 - 16:05 6P19 Jan Vít, Lukáš Košek, Fosca Di Gabriele
IN-SITU CHARAKTERIZACE KYSLÍKOVÝCH SENZORŮ V PROSTŘEDÍ EUTEKTIKA PBBI

16:30 - 17:00 — *Prestávka Občerstvenie*

19:00 - 24:00 — *Slávnostný večierok*

Piatok, 13. september 2013

11:10	12:00	Panelová diskusia ako záver zjazdu
12:00	*14:00*	*Obed*